前　言

《化工数学模型》是在作者应邀为华东理工大学应用数学系毕业班开设的同名课程讲稿基础上改写而成。该课为40学时，已经给三届毕业班学生讲授过。该课的目的是培养学生的抽象思维能力，以便能面对实际的化工问题，建立起恰当的微分方程(组)，运用所学的解题方法，求解这些方程式(组)。

实际上化工类研究人员对本书的内容也是十分需要的，国内或国外的化工类学术期刊上几乎每期必有数学模型出现。这是化工学科发展的大势所趋，世纪之交的潮流所向。化工类大学生，尤其是各专业研究生必须迎接这个挑战。因此，与其说本书是为应用数学学生而写，不如说是为化工类的学生更确切些。

考虑到目前大学本科的知识结构，本书的前4章均是一些基础性的知识与技巧的补充，而从第5章起才接触到数学模型，其中第8章与第9章则为不同兴趣的读者选读而写的，只有第5、6、7章以及第10章才是化工中“三传一反”的内容。但由于至今建立数学模型还不完全是“科学”，虽然本书介绍和推荐了若干方法，但其中还含有不少“艺术”成分，所以须要随时留意揣摩，借鉴前人的经验和思路以及洞察力，才能有所成就。

本书的读者对象为化学工程与工艺、应用化学、石油采输、聚合物加工、生物工程和生物医药工程、应用数学各专

业的大学高年级学生，尤其是各专业研究生。本书内容应为上述人员的必读教材，以补其知识结构的缺欠。对上述各类专业毕业后的工程师们，也是一本自学指南书，尤其是年轻的科研人员更是必备的参考资料。

本书的编写原则为“少而精”，不追求长篇阔论，尽量举例说明所推荐的建模步骤如何用于实践，读者或许可以从中悟出别人的解题思路和“实践-抽象-实践”的技巧和方法。

本书编写过程中，得到各方面的支持和帮助，我的学生宋道云、翁连进、金浩、周纪宁等帮助打印部分手稿。对曾经帮助过作者的女士们和先生们致以衷心的感谢！特别对本书参考过的专著或论文的作者们致以深深谢意。

本书系利用业余时间写就，缺点在所难免，如蒙读者指出缺点和错误，则作者预致谢忱并在再版时予以改正。

本书完稿之年，适逢香港回归祖国，由此引发作者对我国饱受屈辱的近百年史的回忆。愿以本书的出版，作为小小的庆祝。

江　体　乾

1997 年 7 月 1 日于

上　　海

目　录

第 1 章　数学模型导论 …… 1
1.1　什么是数学模型 …… 1
1.1.1　形象模型 …… 1
1.1.2　数学模型 …… 1
1.2　化工数学模型的分类 …… 2
1.2.1　经验模型 …… 3
1.2.2　随机模型 …… 3
1.2.3　传递过程模型 …… 4
1.3　化工数学模型的建模方法通论 …… 5
1.3.1　通则 …… 5
1.3.2　实例研究 …… 5
1.4　为什么要建立数学模型 …… 9
符号说明 …… 10
参考文献 …… 11
第 2 章　微观动量、热量、质量守恒 …… 12
2.1　前言 …… 12
2.2　连续性方程 …… 12
2.3　动量衡算与运动方程 …… 14
2.3.1　用应力表示的运动方程 …… 14
2.3.2　应力与形变速率之间的关系 …… 18
2.3.3　Navier-Stokes 方程 …… 19
2.3.4　非牛顿流体的推广 …… 20
2.4　微分能量衡算方程 …… 22
2.4.1　对流体微元加入的热速率 …… 22
2.4.2　表面应力对微元体所作功率 …… 24
2.4.3　能量方程的特定形式 …… 26

2.5 质量传递微分方程 …… 27
2.5.1 传质微分方程的推导 …… 27
2.5.2 传质微分方程的特定形式 …… 29
符号说明 …… 30
参考文献 …… 31
第3章 润滑近似及其他 …… 32
3.1 前言 …… 32
3.2 直观认识 …… 32
3.3 量级分析 …… 34
3.4 润滑方程 …… 38
3.5 涂布分析 …… 39
3.6 润滑近似法的用例 …… 41
3.7 结语和评论 …… 45
符号说明 …… 46
参考文献 …… 47
第4章 积分平均 …… 48
4.1 前言 …… 48
4.2 时间平均 …… 48
4.2.1 时均化的连续性方程 …… 50
4.2.2 运动方程的时均化 …… 51
4.2.3 能量方程的时均化 …… 54
4.2.4 质量守恒方程时均化 …… 54
4.2.5 均匀湍流 …… 57
4.3 面积平均 …… 59
4.4 局部体积平均 …… 61
符号说明 …… 62
参考文献 …… 62
第5章 传递过程模型建立方法 …… 63
5.1 前言 …… 63
5.2 过程描述 …… 63

5.3 初步分析 …… 64
5.3.1 第一步——确定模拟水平 …… 64
5.3.2 第二步——考虑简化假设 …… 65
5.4 模型开发 …… 71
5.4.1 写出描述方程 …… 71
5.4.2 方程无因次化 …… 73
符号说明 …… 81
参考文献 …… 82
第6章 经验模型——黑匣子模型 …… 83
6.1 前言 …… 83
6.2 因次论分析 …… 83
6.3 化工经验模型建模举例 …… 88
符号说明 …… 92
参考文献 …… 93
第7章 传递过程模型 …… 94
7.1 前言 …… 94
7.2 流动模型 …… 94
7.2.1 密封件在管道中的流动 …… 94
7.2.2 大气污染 …… 98
7.2.3 试井分析 …… 103
7.3 热、质传递模型 …… 110
7.3.1 太阳池 …… 110
7.3.2 冷冻干燥 …… 113
7.3.3 非牛顿流体薄膜流中热质传递模型 …… 118
7.4 伴有化学反应的传递模型 …… 123
7.4.1 甲烷-空气燃料电池 …… 123
7.4.2 伴有二级不可逆反应的幂律流体薄膜流中的化学吸收 …… 129
符号说明 …… 134
参考文献 …… 135

第 8 章　生物、医学工程中的模型 …… 137
8.1　前言 …… 137
8.2　血液流动的数学模型 …… 137
8.3　血液氧合反应器模型 …… 141
8.4　血液低密度脂蛋白净化过程中过量净化剂
　　分离——间歇吸附模型 …… 146
8.5　包裹酶反应器 …… 150
符号说明 …… 159
参考文献 …… 160
第 9 章　聚合物加工中的模型 …… 162
9.1　前言 …… 162
9.2　薄膜吹塑 …… 162
9.3　纤维纺丝 …… 169
9.4　压延 …… 175
9.5　挤出 …… 179
9.6　导线涂布 …… 183
符号说明 …… 188
参考文献 …… 188
第 10 章　随机模型 …… 189
10.1　前言 …… 189
10.2　基本定义 …… 190
10.3　停留时间分布的研究 …… 194
10.4　N 个串联的理想混合器模型 …… 195
10.5　随机性流动系统模型 …… 198
符号说明 …… 200
参考文献 …… 201

第1章　数学模型导论

1.1　什么是数学模型

数学模型一词在现代化工文献上已是屡见不鲜了，那么什么是数学模型呢？要回答这个问题，必须先从“模型”说起。

1.1.1　形象模型

不管是通常，还是化学工程学科中，最容易理解的是形象模型。比如，地球仪就是地球的缩小。上海浦东开发初期，首先能见到的是浦东规划的模型，几年以后才能看到建设起来的现代化浦东新区。可以说，形象模型是现实世界的缩放。尽管仅仅是缩放，也是很有用处的。比方说化工厂的设计、管路布置、设备的安装位置、标高等都可以按一定比例缩小的模型来表达，省去平、立面图，对复杂的管路车间尤为合适，这就叫做模型设计。

1.1.2　数学模型

数学模型则与上述不同，它是对过程或现象简化后质的描述。它需要经过真实世界的检验，如图1-1所示。

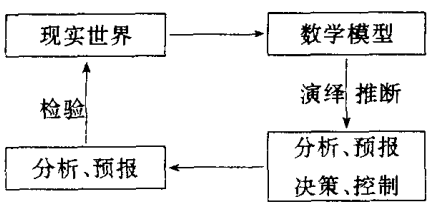


图1-1　数学模型框图

由上可见，数学模型“源于现实，高于现实”。和通常的艺术“源于生活，高于生活”一样，是一种抽象和提高。艺术可以鞭策丑恶，指导生活，数学模型也是一种抽象，同样它也可以指导现实，指导工程放大。如果要给数学模型下个定义的话，那么，我们可以说：数学模型是对现实世界某指定现象或过程，为特定目的做了一些必要的简化与假设，运用适当的数学工具得到的一个数学结构。

对化学工程学科来说，它经历了本世纪 20 年代到 50 年代的经验时期，其后接踵而来的计算机时期以及 80 年代开始的数学模型时期。现在的化学工程期刊中每一期都有数学模型的文章发表，可见，数学模型的需要正与日俱增，越来越显得重要。

对化学工程来说，上述数学模型定义中最后提到的一个数学结构，广义上讲可以是一个公式或者一个数据表或图(如湿空气 I-X 图)；但狭义上讲，所谓数学模型指的是一个解析表达式或方程组(代数或微分方程组)。

从上述数学模型的定义中我们可以体会到人们对问题的洞察力与想象力的重要性，否则，无从简化、假设和抽象。大科学家爱因斯坦曾说过：“想象力比知识更重要，因为知识是有限的，而想象力概括着世界的一切，推动着进步，并且是知识的源泉。”

本书的重点是建立数学模型，因此，培养想象力和抽象能力自然就成为本书的着眼点。

1.2 化工数学模型的分类

数学模型可以不同的标准(如变量、时间、了解程度等等)进行分类。所以说，对化工数学模型进行分类既困难又多少

带有点任意性。

为了全面起见，本书还是将化工中所用的数学模型分为经验模型、随机模型与传递过程模型三大类，现分述如下：

1.2.1 经验模型

化工中最低级的数学模型是经验模型，因为它仅仅是经验数据的关联。在所论变量之间的函数形式是任意的，虽然这种可能比另一种更便于应用，典型例子如幂级数、指数、多项式等。所选函数的系数是由曲线拟合后求取的。

通常，任何形式函数的项数越多，其与实验数据的符合越好；不过，对实用目的来说，宁愿要一个简单的经验关联式。必须指出，不论其最终的形式如何，经验常数不可能有明确的物理意义。换句话说，经验模型不可能有理论价值。

经验关联式如果应用于原试验的同一个操作过程是很有价值的。换句话说，这种模型用于原试验之外的操作是不合适的。

虽然这种模型不是本书的主题，鉴于它在化工中量大面广，本书将在第 6 章中予以讨论。

1.2.2 随机模型

不少操作过程由于它过分复杂，不允许我们全部了解其机理，虽然作为基础的现象可以被判别出来，但仍然需要一些实验提供系统特性的附加信息。在此情况下，可以通过显示响应技术得到输入量和输出量之间的经验关联。将示踪物质加到进入系统的物质中去，其响应可以在出口流中记录。但是请注意，就流型而论得到的实验信息是不完全的，它仅仅能给出时间尺度。既然如此，就要假设一个流动模型并且将预测的响应曲线与一个真实系统相对比。这样一来，就探索出一个真实流型的很好的近似(参见本书第 10 章内容)。

随机模型的变化是复杂的，并且以不同参数的数目为特征，比如在分散模型、串联反应釜、返混模型等中可以看到。这种随机模型在研究反应器(填料的、流态化的等)以及血液循环系统中特别有用。

1.2.3 传递过程模型

一般说来，一个特殊操作的系统变量之间的任何定量关系对模拟此过程或预测其行为都是没有价值的。只有数学模型可以信赖，哪怕超出实验范围亦可。因为化学工程及其相关的科学的理论基础，是建立在守恒和附加的本构关系之上的。

以动量、能量和质量守恒为出发点的基本原理对任何给定的系统，构成了数学描述的基础。

一个完全的描述还需要一些物料特性的信息，这些信息由本构方程来提供。本构关系严格地说，也仅是一种理论的假设，这些表达式的形式由实验或经验认定。

基本方程既可以用于分子水平，也可以用于连续介质水平。传递过程的知识对分子水平是受限制的，在将分子水平分析的结果转化到过程中重要的量上去时，会碰到相当大的困难。但从原理上说，对过程从分子水平上了解还是很希望的，因为它能增长对所论过程的知识，特别是可以借以预测传递系数。

为便于工程分析，常假设为连续介质，如此则相互依赖的变量成为空间以及时间的连续函数。如上所述，传质系数理论上可以从分子理论加以预测。但是大多数情况下，此系数还是从过程中得到的。

前已指出，像这样的描述不可能构成一个数学模型。对所研究过程的深入了解，对判定现象中各量孰重孰轻，特别

是数学等价是必须的。在这个基础上，基本方程式可因舍弃所有不相干的项数而得到简化，如此，就构成了给定问题的数学模型。对数学量处理方法的改进，增加了解析解或数值解的机遇。

简而言之，直接根据物理或化学基本原理建立的模型，虽然其参数或系数是未知的，须由实验数据估计，但此类模型与化学工程直接相关联，称为传递过程模型，是一种确定性模型，也是本书的重点所在(参见第 7 章和第 8 章)。

1.3 化工数学模型的建模方法通论

1.3.1 通则

包括一个以上因变量的物理场模型的建模原则：

(1) 先深入了解此物理场的充分内涵；

(2) 选择基本变量，依据是守恒原则和物理的性质；

(3) 选择特征变量，即这些变量便于测量，又与基本变量有明确的关系；

(4) 应用守恒原理以列出描述方程(或称基本模型方程)；

(5) 考查方程是否满足此物理场的初始及边界条件；

(6) 满足即是数学模型，否则重选基本变量。

以上通则可以框图形式列出，如图 1-2 所示。

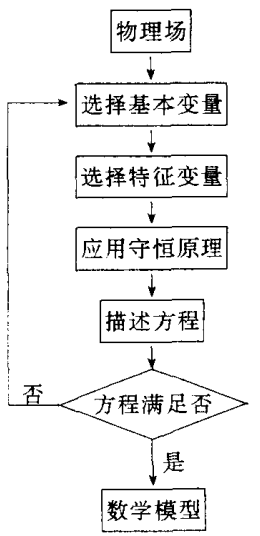


图 1-2 建模通则框图

1.3.2 实例研究

现选化学工程中最简单的问

题，作一建模实例研究。

例 1-1 圆柱形水箱的加水和排(放)水问题，是化工中最常见、最简单的问题。

设进口流量 q_f 与出口流量 $q(m^3/s)$均为常数。

本问题的基本变量是质量。流体密度 $\rho(kg/m^3)$为常量，要解决的问题是水位高度 $h(m)$与质量的关系。

取限定容积为水箱，如图 1-3 所示。任何时刻 t 时，质量为 $\rho Ah(t)$，在时间间隔$[t+\Delta t-t]$内，为 $\rho q_f\Delta t$ 和 $\rho q\Delta t$。此处，A 为水箱的截面积(m^2)。

按照质量守恒定律，得变量之间关系为：

$$\rho Ah(t+\Delta t)-\rho Ah(t)=\rho q_f\Delta t-\rho q\Delta t$$

亦即
$$h(t+\Delta t)-h(t)=\frac{1}{A}(q_f-q)\Delta t$$

以上限制条件为：Δt 时间内 q_f 与 q 均不随时间而变化，否则写成积分形式，即

$$\rho Ah(t_2)-\rho Ah(t_1)=\int_{t_1}^{t_2}\rho q_f(t)\mathrm{d}t-\int_{t_1}^{t_2}\rho q(t)\mathrm{d}t$$

所以
$$h(t_2)=h(t_1)+\frac{1}{A}\int_{t_1}^{t_2}[q_f(t)-q(t)]\ \mathrm{d}t$$

引用中值定理：

$$h(t+\Delta t)-h(t)=\frac{1}{A}(\overline{q_f-q})\Delta t$$

当 $\Delta t\to 0$ 时，得

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{A}(q_f-q) \tag{1-1}$$

或者写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho Ah=\rho(q_f-q) \tag{1-2}$$

以上就是 q_f、q 均为常量的简单物理场的数学模型。

但是，只要稍微改变一下条件，比如，水箱几何形状改为三角形，式(1-1)或式(1-2)就不能满足，需另加局部关系式。

考虑如图 1-4 所示的三角剖面水槽，其宽为 B，长为 L，其他符号同前。

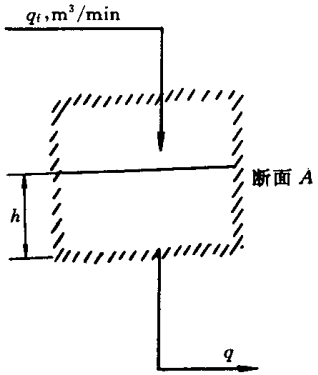


图 1-3　限定容积图

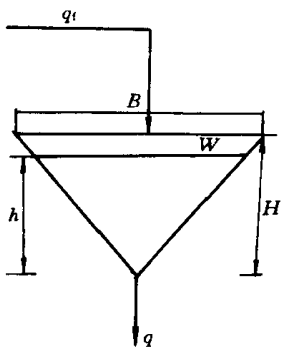


图 1-4　三角形水槽

按上述步骤可得：

$$\rho V(t_2)=\rho V(t_1)+\rho\int_{t_1}^{t_2}[q_f(t)-q(t)]\,\mathrm{d}t$$

或者

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t}=q_f-q \tag{1-3}$$

式(1-3)是描述方程。其中尚不知道 V、h、t 的具体函数关系。因此，尚不能说明问题，必须补充局部关系式。

由图可知，

$$V(t)=\left(\frac{hW}{2}\right)L=\frac{BLh^2}{2H} \tag{1-4}$$

将式(1-4)代入式(1-3)，可得

$$\frac{dh^2}{dt}=\frac{2H}{BL}(q_f-q)$$

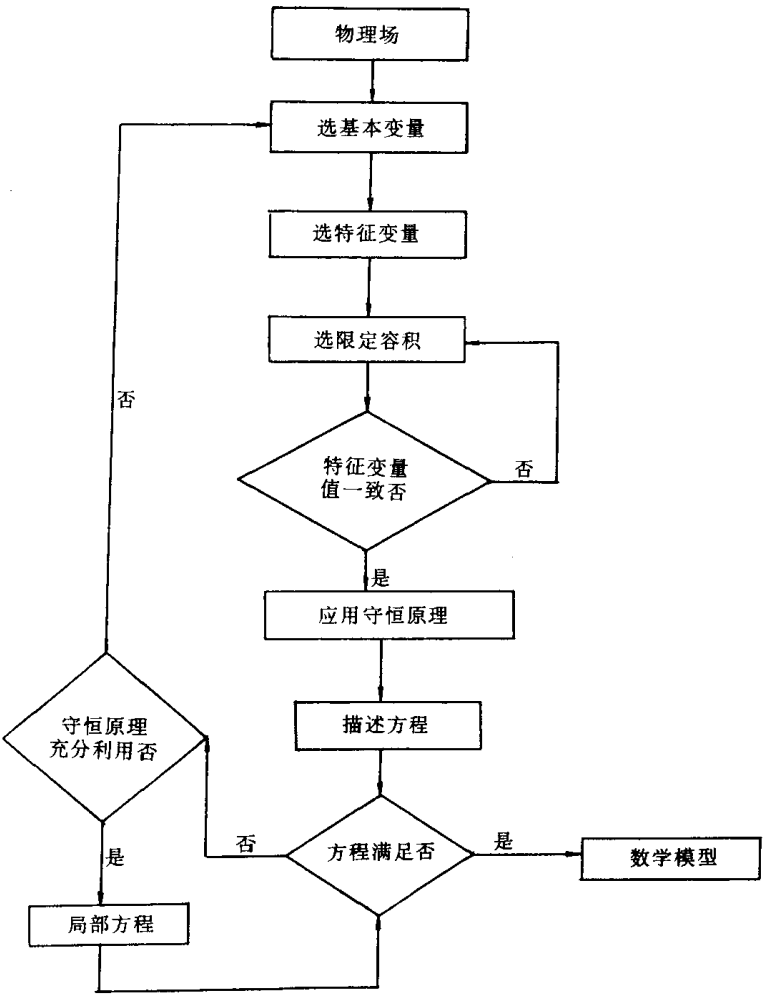


图 1-5　修正过的框图

假设 q_f 与 q 都等于常数，则有下列积分：

$$\int_{h_0}^{h} \mathrm{d}h^2 = \frac{2H}{BL}(q_i - q)\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t$$

所以

$$h = \sqrt{h_0^2 + \frac{2H}{BL}(q_i - q)(t - t_0)} \tag{1-5}$$

上式即此问题的数学模型。当 q_i 与 q 均不等于常量时，其数学模型又将如何呢？此问题留给读者去解决。

因此，如图 1-2 所示的框图应作如下修正(图 1-5)。

1.4 为什么要建立数学模型

我们知道，有一些工业过程没有利用任何理论知识照样成功地进行操作，这主要靠长期积累的经验。由于这个原因或者部分由于这个原因，就出现了过程放大的困难。典型的例子是设备放大，经验关联式的外推，过程改进，提高产品质量等。显然，在解决这些问题之前，拥有某种程度的理论上的了解是必不可少的。

传递过程分析的目的就是研究工业过程以回答上述问题的。换言之，即在给定输入和系统参数中决定输出量的一个尝试。此目的用数学模型模拟可以很容易达到，这当然要靠对机理的清楚了解。

数学模拟是用精确的定量的数学描述来表达一个工程问题。利用数学语言的优越性和逻辑性提供了简化模型的优势，无容讳言，这种数学模拟的特别前景具有很强的吸引力。

在原理上，对问题的物理化学定律应首先确立；之后，即可进行数学描述。但是，必须指出，方程在这种阶段仅仅是基本原理的数学表述，构不成一个数学模型。此时的数学式不易处理，而方程不能解，即使最好的计算机也无济于事。深入了解所涉及现象，对找出问题的重要特性是必需的。原来

的数学描述可因引入各种来自物理分析的近似而简化。这种简化后的数学方程反映着系统的突出特点，就构成了系统的数学模型。通常，此模型是物理场的复杂性与数学的有限性之间的一种妥协的产物。

有时，现在的知识对所论过程的复杂性还不能单独由理论得到包含所有输出的公式，在这种情况下，就得求助于建立一个混合模型，此模型由理论表达式再结合经验关联式所组成。

由正确描述的模型方程所定量化的化学工程问题，就构成了传递过程分析的基础。在化学工程领域中，大多数的数学模型均系在传递过程原理以及控制物质化学或物理变化的定律基础上建立的。需要指出的是，超出化学工程传统领域，即环境和生物医学工程，也可用同样的理论来处理。

综合说来，对一个给定的物理场开发一个有效的数学模型需要对它的物理化学原理有某种程度的了解。一个数学模型反映了过程的主要特性，因而对解决典型的工程问题是一个有力的工具。

各个数学模型之间的基本区别来源于变量的性质[1]，变量有确定的赋值或者一个赋值集就构成一个确定性的模型。换句话说，如果变量的赋值不能确切知道，只能由一个统计概率给出，那么，此模型即称之为随机模型。

本书中以确定性数学模型为重点，随机模型只在第10章中予以简单介绍。

符 号 说 明

A 截面积[m^2]

B 宽度[m]

h 高度[m]

H 高度[m]

L 长度[m]

q 出口流量[m^3/s]

q_f 进口流量[m^3/s]

t 时间[s]

V 体积[m^3]

W 宽度[m]

希腊字母

ρ 密度[kg/m^3]

下标

f 流体的

0 开始的

参 考 文 献

[1] 姜启源．数学模型．北京：高等教育出版社，1991

[2] 江体乾．化工数据处理．北京：化学工业出版社，1984

[3] Stanislav. Mathematical Modeling of Transport Phenomena Processes. ANN ARBOR SCIENCE, 1982

[4] Seinfeld J H, Lapides L. Mathematical Methods in Chemical Engineering(Vol 3). 中译本．1981

[5] 江体乾等．基础化学工程(第一、二册)．上海：上海科学技术出版社，1990

第 2 章　微观动量、热量、质量守恒

2.1　前　　言

如上章所述，数学模型多半是建立在传递过程原理之上的，同时运用数学语言对过程或者工程问题加以描述。基于这一点，必须考虑流体内部的三传规律，这就不是过去只从宏观上看问题可以解决的，必须进行微观或细观衡算，即微分衡算。

在任何一个流动系统中这种衡算必须从系统中无限小的微元体中进行。下面就来看看是如何用数学语言进行分析的。

本章主要以单组分流体或体系为讨论对象和出发点。

2.2　连续性方程

在连续介质中取一无限小的微元体，如图 2-1 所示，应用质量守恒定律，进行微分衡算，则可得出结果。具体推导如下：

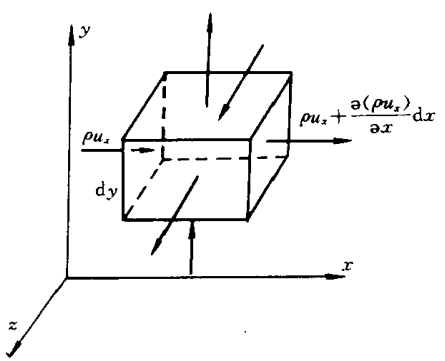


图 2-1　微元体示意图

在直角坐标系中取一微元体 $\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$，当其体积缩小时即成为一点$(x, y, z)$，此处的质量通量应为 $\rho\boldsymbol{u}$，其分量应为 ρu_x，ρu_y，ρu_z。

根据质量守恒定律，

下式成立：

（输出的质量流率）－（输入的质量流率）＋（累积质量流率）＝0。

如图 2-1 所示，我们先来看看净输出的质量流率：

在 x 方向：

$$\left(\rho u_x+\frac{\partial \rho u_x}{\partial x}\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}y\mathrm{d}z-\rho u_x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=\frac{\partial \rho u_x}{\partial x}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

在 y 方向：

$$\left(\rho u_y+\frac{\partial \rho u_y}{\partial y}\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}z-\rho u_y\mathrm{d}x\mathrm{d}z=\frac{\partial \rho u_y}{\partial y}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

在 z 方向同理得

$$\left(\rho u_z+\frac{\partial \rho u_z}{\partial z}\mathrm{d}z\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\rho u_z\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{\partial \rho u_z}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

微元体内累积质量流率为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

代入上述文字表达式，则得：

$$\frac{\partial \rho u_x}{\partial x}+\frac{\partial \rho u_y}{\partial y}+\frac{\partial \rho u_z}{\partial z}+\frac{\partial \rho}{\partial t}=0 \tag{2-1}$$

或者写成向量形式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho \boldsymbol{u})=0 \tag{2-2}$$

上述两式无条件适用于一切流体。当介质的密度 ρ 为常量时，则上式可简化为：

$$\nabla\cdot(\rho \boldsymbol{u})=0$$

或者

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0 \tag{2-3}$$

如果上式推广到一般坐标系，则上式可写成：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+(\rho u^m)_{,m}=0 \tag{2-4}$$

对不可压缩流体，则进一步简化为

$$u^m{}_{,m}=0 \tag{2-5}$$

式(2-4)，(2-5)中符号的含义读者参见张量简介[4]或者其它的张量书籍。以上就是单组分或均质单组分流体介质的连续性方程。

同理，对多组分系统可以得到其连续性方程如下：

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t}+\nabla\cdot(\boldsymbol{j}_i+\rho_i\boldsymbol{u})=R_i(i=1,2,\cdots,n) \tag{2-2a}$$

式中 ρ_i——i 组分的密度；

$\boldsymbol{j}_i$——i 组分的分子扩散通量；

R_i——如组分 i 为化学反应生成物时的质量流率；

$\boldsymbol{u}$——流体流动的速度向量。

2.3 动量衡算与运动方程

2.3.1 用应力表示的运动方程

按照牛顿第二定律，流动流体的动量随时间的变化率应等于作用在该流体上的诸外力的向量和，亦即

$$\boldsymbol{F}=\frac{\mathrm{d}(M\boldsymbol{u})}{\mathrm{d}t} \tag{2-6}$$

式中 $\boldsymbol{F}$——诸外力的向量和；

M——流体的质量；

$\boldsymbol{u}$——流体的速度向量；

t——时间。

对质量不变的流体来说，上式亦可写成：

$$\boldsymbol{F}=M\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t} \tag{2-7}$$

式中的$\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}$为速度对时间的随体导数，表示流动流体的加速度。随体导数：

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}=\frac{\partial}{\partial t}+u_x\frac{\partial}{\partial x}+u_y\frac{\partial}{\partial y}+u_z\frac{\partial}{\partial z}$$

对于具有一定质量且流动着的微元流体，则式(2-7)变为：

$$\mathrm{d}F_i=\mathrm{d}F=\rho\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\frac{\mathrm{D}u_i}{\mathrm{D}t} \tag{2-8}$$

式中 $\mathrm{d}x$，$\mathrm{d}y$，$\mathrm{d}z$——分别为微元流体的三个边长。

上述牛顿第二定律所说的诸外力，在任何情况下，由体积力(或质量力)和表面力(机械力)所组成。分别以符号$\boldsymbol{F}_\mathrm{B}$和$\boldsymbol{F}_\mathrm{S}$表示之，其中的$\boldsymbol{F}_\mathrm{S}$又分解为法向力和剪切力两种，现分述如下：

(1) 质量力(重力场)

如上所述，质量力就是作用在所考察流体整体上的外力，在重力场中对一微元体说来，在x方向上的质量力分量$\mathrm{d}F_{x\mathrm{B}}$应为：

$$\mathrm{d}F_{x\mathrm{B}}=(\rho\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z)X \tag{2-9}$$

式中X为单位质量流体的质量力在直角坐标系x轴方向上的分量。即

$$X=g\cos\beta=F_{x\mathrm{g}} \tag{2-10}$$

式中β为x轴向与重力方向之间的夹角。如x轴取水平方向时，则$X=F_{x\mathrm{g}}=0$。

(2) 表面力

表面力是指流动着的微元体表面所受的外力。这些外力是由与该微元相邻的外部流体而来的。在所论情况下，即系由静压力和粘性力而来的。

为简明起见，先观察微元体的一个表(平)面，如图 2-2 所示，作用在这个表(平)面上有三个力的分量，即一个法向应力 τ_{xx}和两个剪切应力分量 τ_{xy}，τ_{yz}。

现在作如下约定：在τ_{xy}下标中的第一个字母表示应力分量作用面的法向，第二个字母表示应力本身的作用方向。

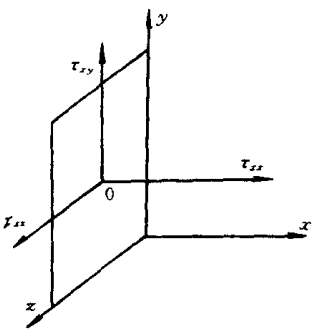


图 2-2 微元体的一个平面(y-z 平面)上的作用应力图

如图 2-3 所示，一个小微元体 6 个表面上都受来自相邻流体的外力作用。所幸的是每一种这样的作用力在直角坐标系中又都可以分解成三个平行于 x、y、z 三个坐标轴的应力分量。图 2-3 中仅示出了在 x 方向上的这种机械力的应力分量，其下标符号意义与前约定相同。

由图 2-3 不难看到，在 x 轴方向上只有一个法向应力分量

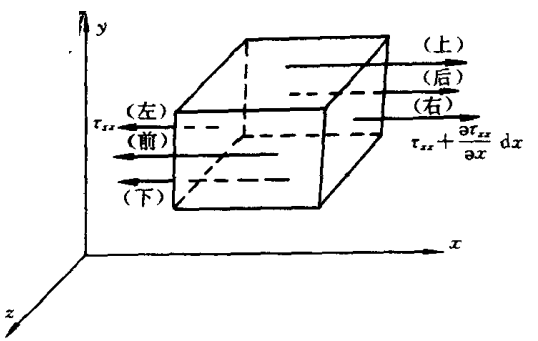


图 2-3　微元体应力分量分布示意图

τ_{xx}和两个剪切应力分量，一个来自垂直于 y 轴的上或下面，即 τ_{yx}，另一个来自垂直于 z 轴的前或后面，即 τ_{zx}。由此不难推断，整个微元体只需 9 个应力分量即可以描述，其中 3 个为法向应力分量和 6 个剪切应力分量。

可以证明，上述 6 个剪切应力分量虽然可以使微元体发生旋转，但它们彼此之间不是独立的，而是相互关连，即

$$\tau_{xy}=\tau_{yx},$$

$$\tau_{yz}=\tau_{zy},$$

以及

$$\tau_{xz}=\tau_{zx} \tag{2-11}$$

现有来考虑一下作用于小微元体表面上的净机械力(表面力)。首先看一看 x 方向上的净机械力分量 $\mathrm{d}F_{xs}$。参照图 2-3，显然我们有：

$$dF_{xs}=\left[\left(\tau_{xx}+\frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x}\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}y\mathrm{d}z-\tau_{xx}\mathrm{d}y\mathrm{d}z\right]+$$

$$\left[\left(\tau_{yx}+\frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y}\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}z-\tau_{yx}\mathrm{d}x\mathrm{d}z\right]+$$

$$\left[\left(\tau_{zx}+\frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z}\mathrm{d}z\right)\mathrm{d}y\mathrm{d}z-\tau_{zx}\mathrm{d}z\mathrm{d}y\right]$$

经简化后可得：

$$\mathrm{d}F_{xs}=\left(\frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{2-12}$$

由前所述，在 x 方向，作用于小微元体的惯性力分量(即外力分量)系由同方向上的质量力分量和机械力(表面力)分量所组成，即

$$\mathrm{d}F_x=\mathrm{d}F_{x\mathrm{B}}+\mathrm{d}F_{xs} \tag{2-13}$$

现在，分别将式(2-8)、(2-9)和(2-12)代入或(2-13)中，化简后可得：

$$\rho \frac{Du_x}{Dt}=\rho X+\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \tag{2-14a}$$

同理，可得 y 轴方向和 z 轴方向上的表达式如下：

y 轴方向
$$\rho \frac{Du_y}{Dt}=\rho Y+\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \tag{2-14b}$$

z 轴方向
$$\rho \frac{Du_z}{Dt}=\rho Z+\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zz}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \tag{2-14c}$$

以上三个方程称为以应力表示的粘性流体运动微分方程，亦称为 Cauch 应力方程。文献上有时将上述方程写成如下张量形式：

$$\rho \frac{Du_i}{Dt}=\frac{\partial S_{mi}}{\partial x_m}+\rho g_i \quad \begin{pmatrix} m=1,\ 2,\ 3 \\ i=1,\ 2,\ 3 \end{pmatrix} \tag{2-15}$$

细查式(2-14)三个方程中已知量为 3 个，即 X，Y，Z。而独立的未知量却有 10 个之多，一个 ρ，3 个 u_i，6 个 τ_{ij}，数学上无解，必须补充关系。

2.3.2 应力与形变速率之间的关系

对一维牛顿流体，应力与剪切速率(形变速率)之间关系为

$$\tau=\mu \frac{du_x}{dy} \tag{2-16}$$

式中 τ——x 方向上的剪切应力分量；

μ——流体的粘度。

对三维牛顿流体，每一个剪应力 τ_{ij} 均与相邻两方向上的形变速度有关，可以导出其具体形式如下：

$$\tau_{xy}=\tau_{yx}=\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}\right) \tag{2-17a}$$

$$\tau_{yz}=\tau_{zy}=\mu\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial z}\right) \tag{2-17b}$$

$$\tau_{zx}=\tau_{xz}=\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial x}\right) \tag{2-17c}$$

以上均对剪切应力来说的。其法向应力系由两部分组成，一部分为流体的静压力的作用产生，另一部分为流动时的剪切力所产生，前者为体积形变，后者为线性形变。可以导出法向应力与压力和形变速率关系如下：

$$\tau_{xx}=-p+2\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)-\frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{2-18a}$$

$$\tau_{yy}=-p+2\mu\left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)-\frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{2-18b}$$

$$\tau_{zz}=-p+2\mu\left(\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)-\frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{2-18c}$$

2.3.3 Navier-stokes 方程

将上述剪切力和法向应力的各个表达式代入式(2-14)，则整理后可得完整的运动微分方程式。其在 x 方向上的运动微分方程为：

$$\rho\frac{\mathrm{d}u_x}{\mathrm{d}t}=\rho X-\frac{\partial p}{\partial x}+\mu\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{3}\mu\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{2-19a}$$

类似地可以分别得到 y 方向和 z 方向上的运动微分方程式：

$$\rho\frac{\mathrm{d}u_y}{\mathrm{d}t}=\rho Y-\frac{\partial p}{\partial y}+\mu\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{3}\mu\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{2-19b}$$

$$\rho\frac{\mathrm{d}u_z}{\mathrm{d}t}=\rho Z-\frac{\partial p}{\partial z}+\mu\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{3}\mu\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{2-19c}$$

统一写成向量的形式为：

$$\rho \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}=\rho \boldsymbol{F}_g-\nabla p+\mu \nabla^2 \boldsymbol{u}+\frac{1}{3}\mu \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \quad (2\text{-}20)$$

对不可压缩的牛顿流体，由于连续性方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u}=0$$

所以，必然有

$$\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}{\mathrm{D}t}=\boldsymbol{F}_g-\frac{1}{\rho}\nabla p+\nu \nabla^2 \boldsymbol{u} \quad (2\text{-}21)$$

这就是著名的 Navier-Stokes 方程，表示某瞬间流场中某一位置处流体运动规律，在流体力学中有着广泛的应用。

原则上讲，上式适用于层流和湍流，实际上只能适用于层流。这是因为湍流中有众多旋涡，它们高频脉动，无法追踪。如何应用于湍流，将在本书第 4 章中讨论。

2.3.4 非牛顿流体的推广

由于式(2-15)中应力 S 可以写为：

$$S_{ij}=-p\delta_{ij}+\tau_{ij} \quad (2\text{-}22)$$

而各向同性压力

$$p=-\frac{1}{3}(S_{11}+S_{22}+S_{33})=\frac{1}{3}trS \quad (2\text{-}23)$$

代入式(2-15)中可得

$$\rho \frac{\mathrm{D}u_i}{\mathrm{D}t}=-\delta_{mi}\frac{\partial p}{\partial x_m}+\frac{\partial \tau_{mi}}{\partial x_m}+\rho F_{gi}=-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{\partial \tau_{mi}}{\partial x_m}+\rho F_{gi} \quad (2\text{-}24)$$

此式又可写为更一般的张量形式：

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+u^m u^i{}_{,m}\right)=-g^{im}\frac{\partial p}{\partial x^m}+\tau^{im}{}_{,m}+\rho F_{gi} \quad (2\text{-}25)$$

有了更一般化的张量形式的 Cauch 应力方程[式(2-24)或(2-25)]，从原则上讲，只要再配上适当的本构关系，就可以找到或者推导出类似 Navier-Stoks 方程的流体运动微分方程。下面就简单介绍一下本构关系的特殊形式：

（1）理想流体：

$$\boldsymbol{\tau}=0$$

（2）牛顿流体呈线性关系，对不可压缩流体：

$$\boldsymbol{\tau}=-\mu\dot{\boldsymbol{\gamma}}$$

（3）广义牛顿流体(GNF)：

$$\boldsymbol{\tau}=-\eta(\dot{\gamma})\dot{\boldsymbol{\gamma}} \tag{2-26}$$

（4）幂律流体：

$$\boldsymbol{\tau}=K\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{n} \tag{2-27}$$

或者

$$\eta(\dot{\gamma})=K\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{n-1}$$

当 $n<1$时为拟(假)塑性流体；$n>1$时为涨塑性流体；$n=1$时为牛顿流体，$K=\mu$。

但 $\lim\limits_{\dot{\gamma}\to 0}\eta(\dot{\gamma})=\mu$ （第一牛顿区），

$\lim\limits_{\dot{\gamma}\to\infty}\eta(\dot{\gamma})=\eta_{\infty}$ （第二牛顿区）。

幂律流体模型为纯粘性非牛顿流体的代表，在高分子加工工业中有广泛的应用。

（5）线性粘弹性流体模型，即 Maxwall 模型：

$$\boldsymbol{\tau}+\lambda_0\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\tau}=-\eta_0\cdot\dot{\boldsymbol{\gamma}} \tag{2-28}$$

式中 λ_0——松弛时间；

η_0——零剪粘度；

$\boldsymbol{\tau}$——剪应力张量；

$\dot{\boldsymbol{\gamma}}$——剪切速度张量。

（6）非线性粘弹性模型：

$$\boldsymbol{\tau}+\lambda_1\frac{\delta}{\delta t}\boldsymbol{\tau}=\eta_0\cdot\left(\dot{\boldsymbol{\gamma}}+\lambda_2\frac{\delta}{\delta t}\dot{\boldsymbol{\gamma}}\right) \tag{2-29}$$

此式称为 Oldroyd-B 模型，能解释流体爬杆现象。

式中 λ_1——松弛时间；

λ_2——推迟时间；

$\frac{\delta}{\delta t}$——为 Oldrogd 导数，请参阅文献[4]。

2.4 微分能量衡算方程

微分能量衡算方程也简称为能量方程，它能全面描述各种能量之间的变化关系。

能量方程的基本依据是热力学第一定律。它可以像运动方程一样，推导时在流动流体中选一微元体进行分析。将热力学第一定律用于此微元体可有下列规律：

$$\begin{pmatrix}\text{流体微元内}\\ \text{能增长速率}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{加入流体微}\\ \text{元的热速率}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{表面应力对微}\\ \text{元所作的功}\end{pmatrix}$$

上述规律可以用数学语言表达如下：

$$\frac{DU}{Dt}=\frac{DQ}{Dt}+\frac{DW}{Dt} \tag{2-30}$$

式中 U——每千克流体的内能；

Q——对每千克流体加入的热量；

W——表面力对每千克流体作功时而转变为流体内能的部分。

考查如图2-4所示的微元体，其体积为 $dxdydz$，则质量应为 $\rho dxdydz$。式(2-30)可以写成：

$$\rho\frac{DU}{Dt}dxdydz=\rho\frac{DQ}{Dt}\cdot dxdydz+\rho\frac{DW}{Dt}\cdot dxdydz \tag{2-30a}$$

现在对上述各项能量进行分析。

2.4.1 对流体微元加入的热速率

加入流体微元的热能有两种，一为由环境流体导入的热量，另一为微元内部所释放的热量，如核反应或化学反应等。

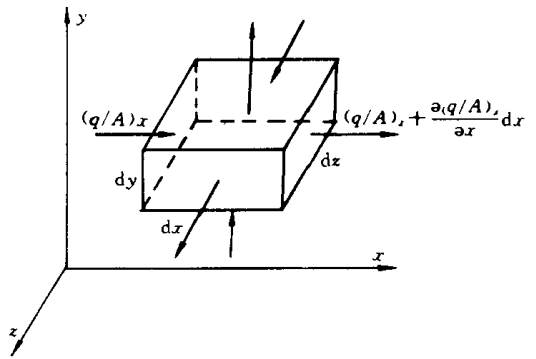


图2-4　微元体的热通示意图

由环境流体导入热通量的确定：

先考察 x 方向：设从微元左侧平面输入的热通量为 q/A，则由其右侧面输出的热通量为：

$$\left[(q/A)_x+\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x}dx\right]$$

故沿 x 方向，此微元体净吸收的热流速率为：

$$\left\{(q/A)_x-\left[(q/A)_x+\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x}dx\right]\right\}dydz$$

$$=-\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x}dxdydz \qquad (2\text{-}31a)$$

同理，可得 y 方向净输入此微元体的热流速率为：

$$\left\{(q/A)_y-\left[(q/A)_y+\frac{\partial(q/A)_y}{\partial y}dy\right]\right\}dxdz$$

$$=-\frac{\partial(q/A)_y}{\partial y}dxdydz \qquad (2\text{-}31b)$$

沿 z 方向为：

$$\left\{(q/A)_z-\left[(q/A)_z+\frac{\partial(q/A)_z}{\partial z}dz\right]\right\}dxdy$$

$$=-\frac{\partial(q/A)_z}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \qquad (2\text{-}31c)$$

将上述三式相加，即得到以导热方式净输入此微元体的热流率为：

$$-\left[\frac{\partial(q/A)_x}{\partial x}+\frac{\partial(q/A)_y}{\partial y}+\frac{\partial(q/A)_z}{\partial z}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \qquad (2\text{-}32a)$$

根据傅立叶定律：

$$(q/A)_i=-k\frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (i=1,2,3)$$

所以，上式又可写成如下形式：

$$k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \qquad (2\text{-}32b)$$

由于加入微元体的热流速率为导热速率与微元体内部释放的热能速率 $\dot{q}$ 两者之和，故式(2-30a)中右侧第一项可写成：

$$\rho\frac{\mathrm{D}Q}{\mathrm{D}t}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z+\dot{q}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \qquad (2\text{-}33a)$$

或者

$$\rho\frac{\mathrm{D}Q}{\mathrm{D}t}=k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)+\dot{q} \qquad (2\text{-}33b)$$

亦即

$$\rho\frac{\mathrm{D}Q}{\mathrm{D}t}=k\nabla^2 T+\dot{q} \qquad (2\text{-}33c)$$

以上各式中 k 为流体导热系数。

2.4.2 表面应力对微元体所作功率

此处考虑的是压力和粘性应力所作的功。压力作用的膨胀功率为 $-p(\nabla\cdot\boldsymbol{u})$，式中“负”号表示压力作用方向与表面的法线方向相反。

粘性应力的作用结果，使流体产生摩擦热，可令单位体积流体微元体产生的摩擦热速率为 ϕ，$J/m^2 \cdot s$。

于是，表面应力对流体微元体作功一项可以表示为 $-p(\nabla \cdot \boldsymbol{u})$ 与 ϕ 两者之和，即

$$\rho \frac{DW}{Dt} = -p(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) + \phi \tag{2-34}$$

将式(2-33c)，(2-34)代入式(2-30)中，整理后则有：

$$\rho \frac{DU}{Dt} + p(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) = k \nabla^2 T + \dot{q} + \phi \tag{2-35}$$

由于内能与焓 H 的关系为：

$$H = U + pV = U + \frac{p}{\rho} \tag{2-36}$$

对上式等号两边取随体导数，可得：

$$\frac{DH}{Dt} = \frac{DU}{Dt} + \frac{1}{\rho}\frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho^2}\frac{D\rho}{Dt} \tag{2-37}$$

或者

$$\rho \frac{DH}{Dt} = \rho \frac{\nabla U}{Dt} + \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} \tag{2-37a}$$

用随体导数表示的连续性方程为：

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \tag{2-38}$$

代入上式，可得：

$$\rho \frac{DH}{Dt} = \rho \frac{DU}{Dt} + \frac{Dp}{Dt} + p(\nabla \cdot \boldsymbol{u})$$

或者

$$\rho \frac{DU}{Dt} + p(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) = \rho \frac{DH}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} \tag{2-39}$$

比较式(2-35)和式(2-39)，可得：

$$\rho \frac{DH}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = k \nabla^2 T + \dot{q} + \phi \tag{2-40}$$

此即能量方程的普通形式，式中各项均表示单位流体的能量速率，$J/m^2 \cdot s$。

2.4.3 能量方程的特定形式

式(2-40)描述的是包括流体流动时有内热源及有摩擦热产生时的普遍形式。

(1) 不可压缩流体对流传热

对流体内部无热源 $\dot{q}=0$，又摩擦热可以忽略不计，即 $\phi=0$时，则上式可简化为

$$\rho \frac{DH}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = k \nabla^2 T \tag{2-41}$$

由于 $\rho=$const，且定容比热容 c_v 与定压比热容 c_p 大致相等，故可得

$$\rho \frac{DH}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = \rho c_p \frac{DT}{Dt} \tag{2-42}$$

对比式(2-41)与(2-42)可得：

$$\frac{DT}{Dt} = \alpha \nabla^2 T \tag{2-43}$$

式中，α 为导温系数，其值为 $k/\rho c_p$，k 为流体的导热系数。

(2) 固体中的导热

由于固体内部不存在宏观运动，速度分量 u_i 皆为零，随体导数也就变成了偏导数。此外，ρ 为常数，$\phi=0$，则式(2-40)即可写成：

$$\rho \frac{DH}{Dt} - \frac{\partial p}{\partial t} = k \nabla^2 T + \dot{q} \tag{2-44}$$

将此式与式(2-42)对比，可知我们有：

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T + \dot{q}/\rho c_p \tag{2-45}$$

当 $\dot{q}=0$时，即无内热源情况下，则有：

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\alpha\nabla^2 T \tag{2-46}$$

此式通常称为 Fourier 第二导热定律。

如果再加上稳态条件，则热传导方程变为 Laplace 方程：

$$\nabla^2 T=0 \tag{2-47}$$

上述各种情况下的能量方程，亦可写成柱坐标和球坐标的形式。需要时可以参考专著[1,2]。

2.5 质量传递微分方程

对多组分系统，流体作多维流动。当在非稳态并伴有化学反应的条件下传质时，必须有传质微分方程，其推导原理为微分质量守恒。下面，以双组分 A、B 系统中考察 A 组分的扩散为例进行推导。需要考虑的不仅有分子运动还有对流运动，或者同时发生化学反应的情况。此时最好在固定体积和固定位置的流体微元中应用质量守恒定律对组分 A 作微分质量衡算。

2.5.1 传质微分方程的推导

如图2-5所示，在流动的流体中选取一个边长为 dx、dy、

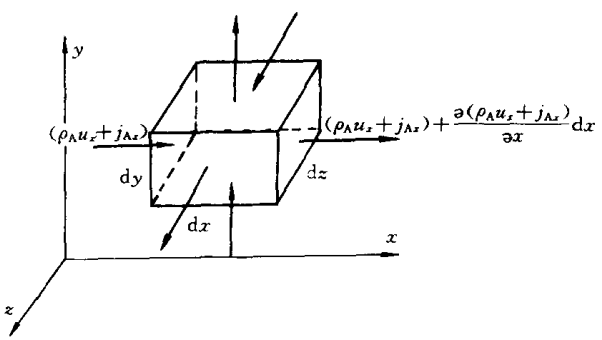


图2-5 微元体的质量通量示意图

dz 的流体微元体。该流体流动的速度向量 $\boldsymbol{u}$(质量速度)在直角坐标系中的分量为 u_x，u_y，u_z；组分 A 的对流通量 $\rho\boldsymbol{u}$ 的各个分量为 $\rho_A u_x$，$\rho_A u_y$，$\rho_A u_z$；组分 A 的分子扩散通量 $\boldsymbol{j}_A$ 各分量为 j_{Ax}，j_{Ay}，j_{Az}；由此可得，组分 A 沿 x 方向输出与输入流体微元的质量流率差为：

$$\left[(\rho_A u_x + j_{Ax}) + \frac{\partial(\rho_A u_x + j_{Ax})}{\partial x}\mathrm{d}x\right]\mathrm{d}y\mathrm{d}z -$$

$$(\rho_A u_x + j_{Ax})\mathrm{d}y\mathrm{d}z = \left[\frac{\partial(\rho_A u_{Ax})}{\partial x} + \frac{\partial j_{Ax}}{\partial x}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \quad (2\text{-}48a)$$

同理，可得沿 y，z 方向输出与输入流体微分的 A 组分质量流率差分别为：

$$\left[\frac{\partial \rho_A u_y}{\partial y} + \frac{\partial j_{Ay}}{\partial y}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \quad (2\text{-}48b)$$

$$\left[\frac{\partial \rho_A u_z}{\partial z} + \frac{\partial j_{Az}}{\partial z}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \quad (2\text{-}48c)$$

又，组分 A 在微元中累积的质量流率为：

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \quad (2\text{-}49)$$

微元体内化学反应生成物组分 A 的质量流率为：

$$\dot{r}_A\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \quad (2\text{-}50)$$

若组分 A 为反应物时 $\dot{r}_A$ 为负值。

由式(2-48)至(2-50)可得组分 A 的微分质量衡算式为：

$$\rho_A\left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right] + \frac{\mathrm{D}\rho_A}{\mathrm{D}t} + \frac{\partial j_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial j_{Ay}}{\partial y} +$$

$$\frac{\partial j_{Az}}{\partial z} - \dot{r}_A = 0 \quad (2\text{-}51)$$

根据 Fick 第一定律，两组分分子扩散时成立下式：

$$j_{Ai} = -D_{AB}\frac{\partial \rho_A}{\partial x_i} \quad (i = x, y, z) \quad (2\text{-}52)$$

代入上式可得：

$$\rho_A(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) + \frac{D\rho_A}{Dt} = D_{AB}\nabla^2\rho_A + \dot{r}_A \tag{2-53}$$

式(2-53)即为通用的传递微分方程式。如若混合物的密度为常数，即

$\rho=\rho_A+\rho_B=$const，则由于连续性方程$\nabla \cdot \boldsymbol{u}=0$，上式变为：

$$\frac{D\rho_A}{Dt} = D_{AB}\nabla^2\rho_A + \dot{r}_A \tag{2-54}$$

亦称组分 A 的连续性方程，是本章第2节末多组分系统连续性方程的一个证明。

如改用 mole 平均速率 u_m 和 mole 通量推导时，在混合物总浓度 C 为常数条件下，对 A、B 两组分系统可得：

$$\frac{DC_A}{Dt} = D_{AB}\nabla^2 C_A + R_A \tag{2-55}$$

2.5.2 传质微分方程的特定形式

上式传质微分方程还可根据具体情况加以简化。

如若在传质过程中不存在化学反应，则式(2-54)或(2-55)可简化为：

$$\frac{DC_A}{Dt} = D_{AB}\nabla^2 C_A \tag{2-56}$$

如果再加上介质不运动(固体或层流流体中)，则上式又可改写为：

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB}\nabla^2 C_A \tag{2-57}$$

此式称为 Fick 扩散第二定律，与热传导中 Fourier 第二定律相类似。

对稳态分子扩散，再加上以上条件，则有

$$\nabla^2 C_A = 0 \tag{2-58}$$

则又变成组分 A 的 Laplace 方程。

以上各式亦可在柱坐标或球坐标中表达，必要时可参阅专著[1,2]。

根据本书的目的，微分质量守恒到此结束。

符 号 说 明

A 截面积[m²]
B 组分名称[—]
C 浓度[kg/m³]
D 扩散系数[m²/s]
F 总外力[N]
g 重力加速度[m/s²]
H 焓[J/kg]
j 分子扩散通量[kg/(s·m²)或 kmol/(s·m²)]
K 稠度系数[N·sⁿ/m²]
k 导热系数[J/(m·s·K)]
M 流体质量[kg]
m 指标[—]
n 流体特性指数[—]
p 压力[Pa]
Q 对每 kg 流体加入的热量[J/kg]
q 热量[J]
R 生成物的质量流量[m³/s]
r 反应速率[kg/(s·m³)]
S 应力张量[Pa]
T 温度[K]
t 时间[s]
U 内能[J/kg]
V 体积[m³]
W 由功转变的能量[J/kg]
x x 轴坐标[m]
y y 轴坐标[m]
z z 轴坐标[m]

希腊字母

α 导温系数[m²/s]
β 夹角[0]
$\dot{\gamma}$ 剪应变速率[s⁻¹]
δ Kronecker delta 符号
η 粘度[Pa·s]
λ 特征时间[s]
μ 粘度[Pa·s]
ν 运动粘度[m²/s]
ρ 密度[kg/m³]
τ 剪应力[Pa]
ϕ 摩擦热速率[J/(s·m²)]

下标

0　零时的

1　松弛的

2　推迟的

B　体的

g　重力的

s　表面的

参 考 文 献

[1] 天津大学等合编. 化工传递过程. 北京：化学工业出版社，1983

[2] 王绍亭，陈涛编. 化工传递过程基础. 北京：化学工业出版社，1987

[3] 韩兆熊编著. 传递过程原理. 杭州：浙江大学出版社，1988

[4] 江体乾著. 工业流变学. 北京：化学工业出版社，1995

[5] 江体乾. 传递过程分析. 上海：华东理工大学出版社，1997

第3章　润滑近似及其他

3.1　前　　言

润滑近似是对“近似平行”壁面流动的有效简化方法。它最早是在1886年由 Reynolds 应用于研究润滑问题而得名。其实，现在已远远超出了润滑问题的范围，它已经成为高聚物加工的基础近似方法，可用于分析挤出、吹膜、压延以及模塑等操作的设计中(详见第9章)；同时它也是 Navier-Stocks 方程[式(2-21)] 近似解的一个重要的方法。

要想学会建立化工数学模型，对这些重要的近似方法掌握越多越好。掌握越多，工作起来越主动。在本章中将首先直观地介绍润滑近似，然后再介绍润滑公式及其进一步的应用。

3.2　直 观 认 识

现考查一个压力驱动的不可压缩牛顿流体在两个逐渐收缩的平板间的流动，其倾角 α 非常小，如图3-1所示。

如果上下两板完全平行的话，即 $\alpha=0$，这将简化成平板间的 Poiseuille 流动，此问题早已研究过，其速度分布为一抛物线，即速度剖面为一抛物线，其上任一点的速度可以写为：

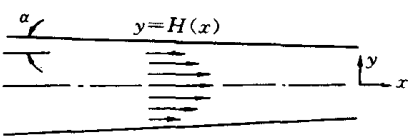


图3-1　渐缩平面流道中压力驱动流动示意图

$$V_x=\frac{H^2}{8\eta}\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right)\left[1-\left(\frac{2y}{H}\right)^2\right] \tag{3-1}$$

式中，H 为两平板间的宽度，即 $y=\pm H/2$；p 为压力；η 为流体的粘度。其平均速度 V_m 可以写成为：

$$V_m=\frac{1}{H}\int_{-H/2}^{H/2}V_x\mathrm{d}y=\frac{H^2}{12\eta}\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right) \tag{3-2}$$

其流量 Q 则应为：

$$Q=WHV_m=W\int_{-H/2}^{H/2}V_x\mathrm{d}y=\frac{WH^3}{12\eta}\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right) \tag{3-3}$$

类似的，则单位宽度上的流量应为：

$$q=\frac{H^3}{12\eta}\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right) \tag{3-4}$$

如果水平倾角 α 很小，人们有理由希望它将与平行平板间流动相近似，所以式(3-3)与(3-4)是完全可以应用的。只不过此时 H 是 x 的一个函数。对任何一个 x，流量都是一个常数，因此，根据式(3-4)，$\mathrm{d}p/\mathrm{d}x$ 必须随 $H^{-3}(x)$而变，不是一个常数。

功率消耗依赖于粘性应力的大小，在平行板间流动时其粘性应力项$2\eta\partial V_x/\partial x$ 等于零，所以，功率消耗就简单地等于流量和压力降的乘积。对于上述近似平行流，可从微分式(3-1)得到$\frac{\partial V_x}{\partial x}$，其结果是正比于 $\mathrm{d}H/\mathrm{d}x$，它在 α 较小时等于 α，因此可以忽略不计。于是在小角度近似范畴内，功率消耗就单独由压力降决定。重写式(3-4)可以得到：

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}=-\frac{12\eta q}{H^3(x)} \tag{3-5}$$

积分上式可得

$$\Delta p=-12\eta q\int_{x_1}^{x_2}H^{-3}(x)\cdot\mathrm{d}x \tag{3-6}$$

于是，功率消耗

$$P=q|\Delta p|=12\eta q^2\int_{x_1}^{x_2}H^{-3}(x)\mathrm{d}x \tag{3-7}$$

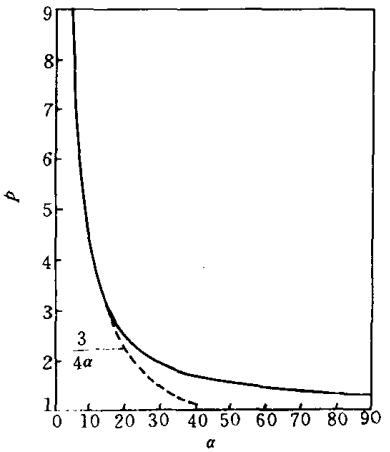


图3-2 无因次动力与收缩角的关系

当 $H(x)$是一个线性函数时，代入式(3-7)可以得到一个简单结果$(3/4)\alpha$，如图3-2所示。假定近似平行流限于半角为15°以下才正确。

必须指出，函数 $H(x)$并未限于线性或非线性。事实上，如图3-3所示，渠道呈现出一个非线性形状，但是，斜率 $\mathrm{d}H/\mathrm{d}x$ 总是很小的。在这种情况下，已知 $H(x)$后仍然可以依照上式计算ΔP和 p 值。

需要注意的是，要求渠道的长度相对宽度必须很长，只有这样才可以认为在任何位置流动是充分发展的。

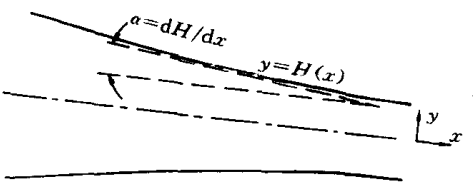


图3-3 渐缩曲线壁面流道示意图

3.3 量 级 分 析

下面将对两维平板流进行润滑近似分析。但是，显然经过适当的变换不同的坐标系，其结果可以用于轴对称的三维流

动，其几何形状如图3-4所示，它是量级分析的基础。其下表面以速度 U 相对上表面运动，几何参数服从如下的不等式：

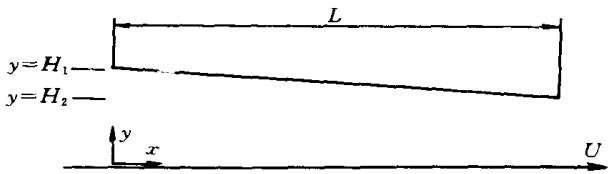


图3-4　两维平板流示意图

$$\frac{H_1}{L}\ll 1 \tag{3-8}$$

$$\frac{H_1-H_2}{L}\ll 1 \tag{3-9}$$

式(3-8)说明是一个长渠道，而式(3-9)是假设“近似平行”。正如一贯处理问题一样，忽略惯性项，则不可压缩牛顿流体的二维运动方程简化为：

$$\begin{cases} 0=\dfrac{\partial p}{\partial x}+\eta\left(\dfrac{\partial^2 V_x}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 V_x}{\partial y^2}\right) \\ 0=-\dfrac{\partial p}{\partial y}+\eta\left(\dfrac{\partial^2 V_y}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 V_y}{\partial y^2}\right) \\ \dfrac{\partial V_x}{\partial x}+\dfrac{\partial V_y}{\partial y}=0 \end{cases} \tag{3-10}$$

进行量级分析，必须将方程无因次化，为此，引入无因次坐标：

$$\bar{x}=\frac{x}{L},\quad \bar{y}=\frac{y}{H_1} \tag{3-11}$$

这是因为此处有两个特征长度，在 y 方向的特征长度肯定是宽度，人们选用 H_1，因为 H_1 和 H_2 无本质上的差别；在 x 方向上的特征长度应遍布 L，故而选用 L 为特征长度。

在流动方向上的特征速度显然应是下板的线速度 U；还有在 y 方向上的特征速度应区别于 U，因为上、下两板并不平行。假设 V 为 y 方向上的特征速度，不过此速度为未知量，尚待确定。于是，人们可以写成无因次速度如下：

$$\tilde{V}_x=\frac{V_x}{U},\quad \tilde{V}_y=\frac{V_y}{V} \tag{3-12}$$

最后，无因次压力可以写为

$$\tilde{p}=\frac{P}{\Pi} \tag{3-13}$$

此处特征压力 Π 也待确定。

于是，将式(3-10)中的连续性方程无因次化，即代入无因次参数，得：

$$\frac{V}{L}\frac{\partial\tilde{V}_x}{\partial x}+\frac{V}{H_1}\frac{\partial\tilde{V}_y}{\partial y}=0 \tag{3-14a}$$

或者

$$\left(\frac{UH_1}{VL}\right)\frac{\partial\tilde{V}_x}{\partial x}+\frac{\partial\tilde{V}_y}{\partial y}=0 \tag{3-14b}$$

上式中括号内数群的量级必有1，这是因为如果 $\frac{UH_1}{VL}>1$，则 $\frac{\partial\tilde{V}_y}{\partial y}$ 可以忽略，于是 $\tilde{V}_x=f(x)$；如果 $\frac{UH}{VL}\ll1$，则 $\frac{\partial\tilde{V}_x}{\partial x}$ 可以忽略，$\tilde{V}_y=\text{const}$，但是根据边界条件要求壁面处 $\tilde{V}_y$ 必须为零，故而要求处处 $\tilde{V}_y=0$，所以我们有

$$V=\frac{UH}{L} \tag{3-15}$$

必须指出，考虑到具体情况，$V\ll U$ 近似一维流动。

下面，转向于式(3-10)中的第一式，可得出

$$0=-\frac{\Pi}{L}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{x}}+\eta\frac{U}{H_1^2}\left[\left(\frac{H_1}{L}\right)^2\frac{\partial^2\tilde{V}_x}{\partial\tilde{x}^2}+\frac{\partial^2\tilde{V}_x}{\partial\tilde{y}^2}\right] \tag{3-16}$$

因为 $H_1/L\ll 1$，故方括号中 x 的微分相对于 y 微分项可以忽略。这就意味着在 y 方向上的变化率较 x 方向的变化率为大，于是，式(3-16)可以重写如下：

$$\left(\frac{\Pi H_1^2}{\eta UL}\right)\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{x}}=\frac{\partial^2 V_x^2}{\partial \tilde{y}^2} \tag{3-17}$$

上式中两项的量级必须相当，因为其中的任何一项都不能取消。实际上，对于平行板间流动而言，上式是压力与剪切力项之间的简化衡算式，于是，数群 $\Pi H_1^2/\eta UL$ 的量级必须为1。这样就得到了特征压力的表达式：

$$\Pi=\frac{\eta UL}{H_1^2} \tag{3-18}$$

最后，考查式(3-10)中的另一动量方程，无因次化之后再利用 Π 的表达式，写成：

$$0=-\frac{\eta UL}{H_1^3}\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{y}}+\frac{\eta U}{LH_1}\left[\left(\frac{H_1}{L}\right)^2\frac{\partial^2 \tilde{V}_y}{\partial \tilde{x}^2}+\frac{\partial^2 \tilde{V}_y}{\partial \tilde{y}^2}\right] \tag{3-19}$$

同理，简化后有

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{y}}=\left(\frac{H_1}{L}\right)^2\frac{\partial^2 \tilde{V}_y^2}{\partial \tilde{y}^2} \tag{3-20}$$

由于已知 $H_1/L\ll 1$，而且所有的特征量已经确定。再无自由度可言，故 $\partial\tilde{p}/\partial\tilde{y}$ 也是可以忽略不计的，而 $\tilde{p}$ 仅仅是 $\tilde{x}$ 的函数，即 $\tilde{p}=f(\tilde{x})$，于是，人们得到了一个初步结论，即压力在渠道宽度上的变化是可以忽略不计的。

作为量级分析的总结，将方程(3-17)和(3-20)回恢到原状，则有

$$p=p(x) \tag{3-21}$$

和

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}=\eta\frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} \tag{3-22}$$

式(3-21)和(3-22)就是描述两平行或近似平行板间流动方程经量级比较后简化的结果。

由此可见，量级分析是一个十分有用的工具，它可以简化微分方程，使其具有最简化的形式。众所周知，著名的边界层方程也是经量级比较简化后得到的。它在建立或求解化工数学模型时必将大有作为。

3.4 润 滑 方 程

式(3-21)和(3-22)是润滑近似的基本方程式。由于它结构非常简单，可以直接解出并可以表达成更有用的形式。因为 dp/dx 与 y 无关，式(3-22)可以积分两次得到

$$V_x=\frac{1}{2\eta}\frac{dp}{dx}y^2+C_1y+C_2 \tag{3-23}$$

式中积分常数 C_1 和 C_2 与 y 无关，仅依赖于 x。如果人们将 y 坐标原点选在运动的表面，则如下的边界条件成立：

$$在\ y=0,\ V_x=U \tag{3-24a}$$

$$在\ y=H(x),\ V_x=0 \tag{3-24b}$$

于是积分常数 C_1 和 C_2 即可定出，式(3-23)可以改写为：

$$V_x=U\left[1-\frac{y}{H(x)}\right]-\frac{1}{2\eta}\frac{dp}{dx}yH(x)\left[1-\frac{y}{H(x)}\right] \tag{3-25}$$

上式为描述压力驱动两平行板间流动速度分布的简化方程，必须指出，式中压力梯度是未知量。这是一个润滑近似应用的典型情况。人们可以也不知道两板间的流量，但是知道它对任何 x 都是相同的值。如上所述，定义 q 为单位宽度上的流量，则有

$$q=\int_0^{H(x)}V_x\mathrm{d}y=\mathrm{const} \tag{3-26}$$

积分后，得

$$q=\frac{UH(x)}{2}-\frac{H(x)}{12\eta}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} \tag{3-27}$$

此方程某些时候可以作为润滑近似的起点。它可以看作$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}$的方程，重排后可得：

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}=12\eta\left[\frac{U}{2H^2(x)}-\frac{q}{H^3(x)}\right] \tag{3-28}$$

积分得

$$p(x)=p_0+6\eta U\int_0^x\frac{\mathrm{d}x}{H^2(x)}-12\eta q\int_0^x\frac{\mathrm{d}x}{H^3(x)} \tag{3-29}$$

式中，p_0是$x=0$处的压力。置换$x=L_0$，则可得出表达流量q，相对速度U以及总压力降$p_0-p(L)$之间关系的表达式，经重排后得：

$$q=\frac{p_0-p(L)}{12\eta\int_0^L H^{-2}(x)\mathrm{d}x}+\frac{U}{2}\frac{\int_0^L H^{-2}(x)\mathrm{d}x}{\int_0^L H^{-3}(x)\mathrm{d}x} \tag{3-30}$$

在上式中，如令$U=0$，则方程退化为式(3-6)；如$\mathrm{d}H/\mathrm{d}x\ll 1$，则$H(x)$可为任意函数。

3.5 涂布分析

如图3-5所示，为一电线涂布的口模剖面的示意图。当然，

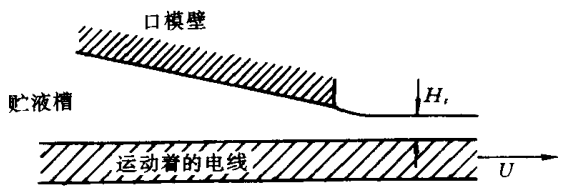


图3-5 电线涂布口模示意图

如果将电线换成片状物则更与以前的分析相一致。

设涂膜厚度为 H_t，则下式成立：

$$q=UH_t \tag{3-31}$$

代入式(3-30)，于是有：

$$H_t=\frac{p_0-p(L)}{12\eta\int_0^L H^{-3}(x)\mathrm{d}x}+\frac{1}{2}\frac{\int_0^L H^{-2}(x)\mathrm{d}x}{\int_0^L H^{-3}(x)\mathrm{d}x} \tag{3-32}$$

如流体经口模无净压差，即 $p_0=p(L)$，则由上式可知 H_t 仅与口模的几何尺寸有关。通常，横过口模的压力降可以利用，并且对一个给定的电线或片材运动速度，压力降决定涂布厚度。反之，对一给定涂布厚度 H_t 需要的压力降可由改写式(3-32)取得：

$$p_0-p(L)=12\eta U\int_0^L\frac{1}{H^2(x)}\left[\frac{H_t}{H(x)}-\frac{1}{2}\right]\mathrm{d}x \tag{3-33}$$

由此可见，H_t 永远不会小于1/2出口空间，否则压力降为负。

考察一下口模中的速度剖面是非常有趣的。如果将式(3-28)中的 q 代之以 UH_t，并将 $\mathrm{d}p/\mathrm{d}x$ 代入式(3-25)，则可以得出

$$V_x=U\left(1-\frac{y}{H}\right)\left[1-3\left(1-\frac{2H_t}{H}\right)\frac{y}{H}\right] \tag{3-34}$$

已知 H 是 x 的函数，括号中的项当 $H>3H_t$ 时，则速度 V_x 为负值，这就意味着在近壁处存在一个回流区，如图3-6所示，净流区必将发生在 $H_0\leqslant y\leqslant H_t$ 之内，此处 H_0 由下列方程所定义

$$0=\int_{H_0}^{H}V_x\mathrm{d}x \tag{3-35}$$

当将式(3-34)代入(3-35)并积分后，H_0 服从下列方程

$$H_0=\frac{H(x)H_t}{H(x)-2H_t} \tag{3-36}$$

方程式(3-36)已经画在图3-6上(对一个板壁)。流体在 $y \leqslant H(x)$ 区域被带出形成涂膜。同时，在 $H_0(x) \leqslant y \leqslant H(x)$ 区域内流体形成环流。其结果，一部分涂料延长了在口模中的停留时间，在不少情况下都可能造成涂料降解。防止的方法为运动电线或片材与口模壁间距离永远不超过 $3H_t$ 即可避免。

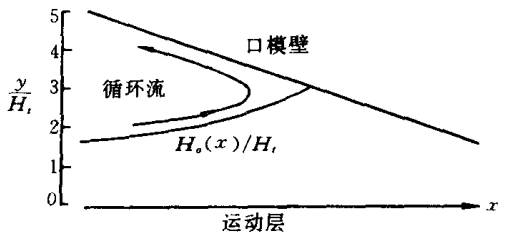


图3-6　口模中的循环流

3.6　润滑近似法的用例

例3-1　已知牛顿流体圆管层流，忽略端效应和粘性发热，可求出速度分布为

$$V_x=\frac{(p_0-p_L)R^2}{4\mu L}\left[1-\left(\frac{r}{R}\right)^2\right] \tag{3-37}$$

体积流量对柱坐标系为：

$$Q=\int_0^{2\pi}\int_0^R V_x r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta=\frac{\pi(p_0-p_L)R^4}{8\mu L} \tag{3-38}$$

上式即为 Hagen-Poiseulle 方程式。式中 R 为圆管半径，μ 为流体粘度，p 为压力，L 为管长。

现考察一收缩管中流动问题，问流量为若干？

根据图3-7，可以写出下式：

$$R(x)=R_0+\left(\frac{R_L-R_0}{L}\right)x$$

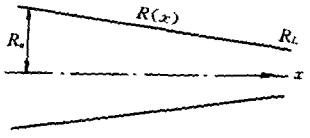


图3-7 收缩变径管示意图

如果收缩十分缓慢，则可局部上应用 Hagen-Poiseulle 方程，只要用 $R(x)$代替式中的 R，用$(-\mathrm{d}p/\mathrm{d}x)$代替$(p_0-p_L)/L$，此即润滑近似。

于是，立即可得

$$Q=\frac{\pi R^4(x)}{8\mu}\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right) \tag{3-39}$$

将上式中 x 全部换成 R 作为独立变量，则得

$$Q=\frac{\pi R^4}{8\mu}\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}R}\right)\left(\frac{R_L-R_0}{L}\right)=\text{const} \tag{3-40}$$

积分可得：

$$Q=\frac{\pi(p_0-p_L)R^4}{8\mu L}\left[1-\frac{1+\left(\frac{R_L}{R_0}\right)+\left(\frac{R_L}{R_0}\right)^2-3\left(\frac{R_L}{R_0}\right)^3}{1+\left(\frac{R_L}{R_0}\right)+\left(\frac{R_L}{R_0}\right)^2}\right] \tag{3-41}$$

对比式(3-38)与式(3-41)可知，方括号内应为渐缩管流量的校正因子。特别当式中 $R_L=R_0$时，则完全退化为式(3-38)，这是完全应该的。

例3-2 落柱粘度计流动分析

如图3-8所示，可以将柱间流动看作与平行板间流动一样，即润滑近似，故而

质量衡算得：$Q=\pi R_0^2V_0=\frac{1}{2}WBV_0+\frac{WB^3}{12\mu}\left(\frac{p_0-p_H}{H}\right)$

柱塞上力平衡：$\pi R_0^2H\rho_0g=(p_H-p_0)\pi R_0^2-(2\pi R_0H)\tau_{yz}|_B$

设 $p=p'+\rho gh$，则 $p_0=p'_0$，$p_H=p'_H-\rho gh$，

对牛顿流体 $\tau_{yz}=-\mu\frac{\mathrm{d}V_z}{\mathrm{d}y}$，代入积分、整理后得

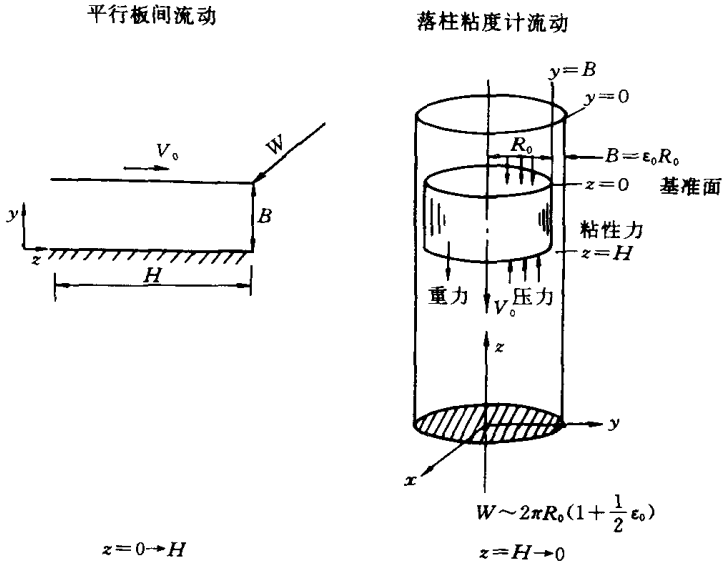


图3-8　落柱粘度计流动与平行板间流动的比较

$$(\rho_0-\rho)g=-\frac{p_0-p_H}{H}\left(1+\frac{B}{R_0}\right)+\frac{2\mu V_0}{R_0 B}$$

因此，再利用　　$W=2\pi R_0\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_0\right)$

代入之，最后可得：

$$\mu=\frac{(\rho_0-\rho)gR_0^2\varepsilon_0^3}{6V_0}\left[\frac{1+\frac{1}{2}\varepsilon_0}{1+\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_0\right)\varepsilon_0}\right]\frac{1}{1+\varepsilon_0}$$

$$=\frac{(\rho_0-\rho)gR_0^2\varepsilon_0^3}{6V_0}\left(1+\frac{3}{2}\varepsilon_0+\cdots\right)\qquad(3\text{-}42)$$

例3-3　波纹管中流动分析

如图3-9所示，波纹管的管径是随管长而变化的，近似表示为：

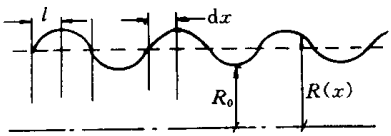


图3-9　波纹管示意图

$$R(x)=R_0\left[1+\alpha\sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)\right]$$

式中，l 是波宽，R_0是平均管径，α 是某一很小的修正量，此问题相当复杂，如用数值解也要花很长的计算时间，而如用“润滑近似”法，则可很快估算出流量来。因为已知管流中其流量为：

$$Q=\frac{\pi(p_0-p_L)R^4}{8\mu L}$$

在局部范围 $\mathrm{d}x$ 内完全可以应用上式，即

$$Q\approx\frac{\pi\left(-\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right)[R(x)]^4}{8\mu} \tag{3-43}$$

因为流量 Q 是不变的，而 p、R 随 x 变化，故

$$-\int_{p_0}^{p_{2l}}\mathrm{d}p=\frac{8\mu Q}{\pi R_0^4}\int_0^{2l}\frac{\mathrm{d}x}{\left[1+\alpha\sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)\right]^4}$$

$$=\frac{8\mu Q}{\pi R_0^4}\int_0^{2l}\left[1-4\alpha\sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)+10\alpha^2\sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)+\cdots\right]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{8\mu Q}{\pi R_0^4}2l(1+5\alpha^2+\cdots)$$

故有

$$Q=\frac{\pi R_0^4}{8\mu}\frac{p_0-p_{2l}}{2l}\left(\frac{1}{1+5\alpha^2}\right) \tag{3-44}$$

例3-4　平行盘间径向流动分析

如图3-10所示，流体在两平行盘间作径向流动。对此，只

要径向流速不太大，可将其当作类似于两平行板间的流动，即润滑近似，人们立即可以得出其流量公式：

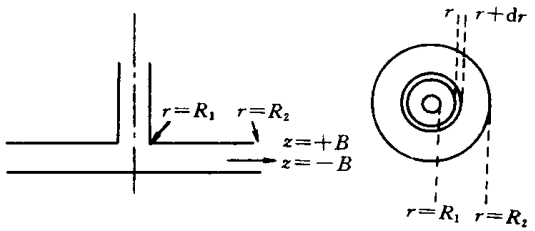


图3-10　平行盘间径向流

1）对牛顿流体

平行板　　平行盘

$$Q=\frac{WB^3}{12\eta}\frac{\partial p}{\partial x} \qquad Q=\frac{(2\pi r)B^3}{12\eta}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}r}\text{或}\ Q=\frac{\pi B^3(p_1-p_2)}{8\eta\ln(R_1/R_2)} \tag{3-45}$$

2）对幂律流体

平行板　　平行盘

$$Q=\frac{2WB^2}{\frac{1}{n}+2}\left[\frac{(p_0-p_L)B}{KL}\right] \qquad Q=\frac{4\pi B^2}{\frac{1}{n}+2}\left[\frac{(p_0-p_L)B(1-n)}{KR_2^{1-n}R_1^{1-n}}\right]^{\frac{1}{n}} \tag{3-46}$$

上式(3-46)仅能适用于缓慢流动，亦即 $De<1$，此时粘弹性影响不重要的场合。

除上述以外，还可以举出更多的用例，这些留给读者去补充吧。

3.7　结语和评论

本章介绍了润滑近似和量级比较，说明润滑近似和量级

比较都可以用来简化流动问题，特别是此流动“几乎”是一维流动。这在流体边界层学说中曾起过重要的作用。

润滑近似法不但可以用于润滑流动，特别是聚合物加工过程中应用是十分成功的，比方在挤出、模压、涂布和压延等典型操作中均有应用。

在此，特别值得指出的是，润滑近似不但是所论问题无法得出或要想得出精确表达式十分困难情况下的近似方法，作者认为润滑近似法也可以认为是以一般守恒方程为基础，经按照具体情况简化后建立化工数学模型的方法之一。

符 号 说 明

B 宽度[m]
C 积分常数[-]
De 德博拉数[-]
g 重力加速度[m/s^2]
H 平行板间宽度，落柱高度[m]
h 高度[m]
K 稠度系数[$N\cdot s^n/m^2$]
n 流体特性指数[-]
p 压力[Pa]
P 功率消耗[W]
Q 体积流量[m^3/s]
q 单位宽度上的流量[$m^3/(s\cdot m)$]
R 管半径，波宽[m]
r 半径方向的距离[m]
U 线速度[m/s]
W 宽度[m]
x x 轴坐标[m]
y y 轴坐标[m]
z z 轴坐标[m]

希腊字母

α 角度，小修正量[度]
η 粘度[Pa·s]
π 常数[-]
Π 特征压力[Pa]
μ 牛顿粘度[Pa·s]
τ 剪应力[Pa]
ϵ_0 小参数[-]

下标

0 0处的，落柱的
1 上表面的

2　下表面的　　L　L处的

参 考 文 献

[1] Morton M Denn. Process Fluid Mechanics. New Jersey, USA: Prentice-Hall Inc, 1980: P265-277

[2] Bird RB, et al. Dynamics of Polymeric Liquids. Vol 1. New York: Wiley, 1988

[3] 江体乾著. 工业流变学. 北京：化学工业出版社，1995

第4章 积分平均

4.1 前 言

前面介绍了微分动量、热量及质量守恒方程，为微观描述传递过程打下了基础。但是，在化学工程，有些过程的数学描述既不可能也不需要在微观或细观上进行。这就需要对微观型的方程进行积分平均。

通常，化学工程中遇到的对基本微观守恒方程的积分平均包括对时间平均和空间平均两类，所得方程即是时间、面积或者体积平均方程。这种积分平均所描述的方程增加了找到模型方程解析解的机会。同时，它需要付出失掉某些可能感兴趣的信息为代价，但平均过程将新的参数引入模型方程之中，这些参数常常仅能由实验所确定。

化学工程的模型化是离不开积分平均的，尤其是时间平均，因为离不开湍流；事实上，湍流运动是不能直接用 Navier-stockes 方程来描述的，必须将变量时均化，这些就是积分平均最重要的用途，不能不讲。

4.2 时 间 平 均

时间平均这种特殊的积分平均最常用于描述湍流运动的基本方程。假设任意量 Q，不管是数量还是向量，在湍流情况下，总是可分为两部分，即时均值 $\overline{Q}$ 和瞬时脉动值 Q'：

$$Q=\overline{Q}+Q' \tag{4-1}$$

任何量的时均值可作如下定义：

$$\overline{Q}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}Q(t')\mathrm{d}t' \tag{4-2}$$

上式的意义是指 Q 的时均值是在时间间隔 Δt 内进行平均的，此 Δt 小于某些时均湍流流场，但大于湍流场的脉动量。

(1) 积分时均值 $\overline{Q}$，由于 $\overline{Q}$ 在此间隔内与时间无关，故有：

$$\overline{\overline{Q}}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\overline{Q}\mathrm{d}t' \tag{4-3}$$

(2) 积分脉动量 Q'，按照式(4-1)以及定义式(4-2)，则成立下式

$$\overline{Q}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\overline{Q}\mathrm{d}t'+\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}Q'\mathrm{d}t' \tag{4-4}$$

将此结果与式(4-3)进行比较不难看出，要式(4-4)成立，必须

$$\overline{Q'}=0 \tag{4-5}$$

(3) 时均值$\overline{Q_1}$与脉动值 Q'_2乘积的积分平均：

$$\overline{\overline{Q_1}Q'_2}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\overline{Q_1}Q'_2\mathrm{d}t'$$

由于$\overline{Q_1}$在给定时间间隔内是一个常量，而由式(4-5)知脉动量的时均值等于零，于是有：

$$\overline{\overline{Q_1}Q'_2}=0 \tag{4-6}$$

(4) 脉动量 Q'_1和 Q'_2之积的积分平均：

$$\overline{Q'_1Q'_2}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}Q'_1Q'_2\mathrm{d}t' \tag{4-7}$$

由于此式无法简化，只能得出一个结论：脉动量之积的时均值是一个非零未知的时间函数。

(5) 某时均量导数的时均值等于此时均量的导数，即根据定义式(4-2)有：

$$\overline{\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}\mathrm{d}t'=\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\bar{u}_x\mathrm{d}t'=\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x} \tag{4-8}$$

亦即
$$\overline{\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y}}=\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y},\quad \overline{\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}}=\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}$$

（6）脉动量导数的时均值等于零，即：

$$\overline{\frac{\partial u'_x}{\partial x}}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\frac{\partial u'_x}{\partial x}\mathrm{d}t'=\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}u'_x\mathrm{d}t'=0 \tag{4-9}$$

亦即
$$\overline{\frac{\partial u'_y}{\partial y}}=\frac{\partial \overline{u'_y}}{\partial y}=0,\quad \overline{\frac{\partial u'_z}{\partial z}}=\frac{\partial \overline{u'_z}}{\partial z}=0$$

有了以上这些运算规则，就可以对连续性方程、运动方程、能量方程以及扩散方程等进行积分平均，得到能用于湍流过程中的传递方程式。

下面，将分别叙述之。

4.2.1 时均化的连续性方程

如前所知，不可压缩流体的连续性方程为：

$$\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}=0 \tag{4-10}$$

按照式(4-1)规定，每一个瞬时量都可以写成该量的时均值和脉动量之和，即 $u_i=\bar{u}_i+u'_i$，$(i=x,y,z)$，代入上式，则有：

$$\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}+\frac{\partial u'_x}{\partial x}+\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y}+\frac{\partial u'_y}{\partial y}+\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}+\frac{\partial u'_z}{\partial z}=0 \tag{4-11}$$

对上式取时间积分平均，则有

$$\frac{1}{\Delta t}\int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2}\left(\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}+\frac{\partial u'_x}{\partial x}+\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y}+\frac{\partial u'_y}{\partial y}+\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}+\frac{\partial u'_z}{\partial z}\right)\mathrm{d}t'=0 \tag{4-11a}$$

根据上述积分平均的规则(5)和(6)，则有：

$$\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}+\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y}+\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}=0 \tag{4-12}$$

或者写成

$$\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{u}}=0 \tag{4-12a}$$

这就是时均化的连续性方程，它可用于一切不可压缩流体的湍流传递过程。

4.2.2 运动方程的时均化

在本书第2章中已讲过，流体动量方程可以很方便地表示为应力的形式，即Cauch方程，它对任何类型的流体是通用的。从式(2-19a)得到不可压缩牛顿流体x方向的表达式如下：

$$\rho\left(\frac{\partial u_x}{\partial t}+u_x\frac{\partial u_x}{\partial x}+u_y\frac{\partial u_y}{\partial y}+u_z\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}+\rho X \tag{4-13}$$

此方程时均化后，则有：

$$\rho\left(\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial t}+\bar{u}_x\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}+\bar{u}_y\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y}+\bar{u}_z\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial z}\right)=-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x}+\frac{\partial \bar{\tau}_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \bar{\tau}_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial \bar{\tau}_{zx}}{\partial z}+\rho X \tag{4-14}$$

上式中左边第一项$\overline{\frac{\partial u_x}{\partial t}}$必然为零，这是因为湍流场是一个随机脉动场，速度随时间的变化有正有负，在一个足够长的时间里其平均值为零。请注意，任何乘积的时均值不是平均值的乘积。对牛顿流体，其应力的时均值可以用平均速度的微分来表示，例如：

$$\bar{\tau}_{yx}=\eta\left(\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial x}+\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y}\right) \tag{4-15}$$

这是基于线性本构关系而来。此外，再考虑式(4-14)中的乘积项，根据本章的开头规则，人们可以写成，比如，

$$\overline{u_y\frac{\partial u_x}{\partial y}}=(\bar{u}_y+u'_y)\frac{\partial}{\partial x}(\bar{u}_x+u'_x)$$

$$=\overline{\bar{u}_y\frac{\partial u_x}{\partial y}}+\overline{\bar{u}_y\frac{\partial u'_x}{\partial y}}+\overline{u'_y\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y}}+\overline{u'_y\frac{\partial u'_x}{\partial y}} \tag{4-16}$$

上式中等号右边第一项，由于两次均与时间无关，所以其平均不会改变，即

$$\overline{\bar{u}_y\frac{\partial u_x}{\partial y}}=\bar{u}_y\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} \tag{4-17}$$

第二项根据规则(6)，必等于零。剩下的两项同理可知。此时，则 x 分量的动量方程现在可以改写成如下形式：

$$\rho\left(\bar{u}_x\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}+\bar{u}_y\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y}+\bar{u}_z\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial z}\right)=-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x}+\frac{\partial \bar{\tau}_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \bar{\tau}_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial \bar{\tau}_{zx}}{\partial z}-\rho\left(\overline{u'_x\frac{\partial u'_x}{\partial x}}+\overline{u'_y\frac{\partial u'_y}{\partial y}}+\overline{u'_z\frac{\partial u'_z}{\partial z}}\right)+\rho X \tag{4-18}$$

根据下列关系式：

$$u'_x\frac{\partial u'_x}{\partial x}=\frac{1}{2}\frac{\partial u'_x u'_x}{\partial x} \tag{4-19a}$$

$$u'_y\frac{\partial u'_x}{\partial y}=\frac{\partial u'_y u'_x}{\partial y}-u'_x\frac{\partial u'_y}{\partial y} \tag{4-19b}$$

$$u'_z\frac{\partial u'_x}{\partial z}=\frac{\partial u'_z u'_x}{\partial z}-u'_x\frac{\partial u'_z}{\partial z} \tag{4-19c}$$

式(4-18)即可以改写成下列形式：

$$\rho\left(\bar{u}_x\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x}+\bar{u}_y\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y}+\bar{u}_z\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial z}\right)=-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\tau}_{xx}-\rho\overline{u'_x u'_x})+\frac{\partial}{\partial y}(\bar{\tau}_{yx}-\rho\overline{u'_y u'_x})+\frac{\partial}{\partial z}(\bar{\tau}_{zx}-\rho\overline{u'_z u'_x})+\rho X \tag{4-20a}$$

同理，可得：

y 分量：

$$\rho\left(\bar{u}_x\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial x}+\bar{u}_y\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y}+\bar{u}_z\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial z}\right)=-\frac{\partial \bar{p}}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\tau}_{xy}-\rho\overline{u'_y u'_x})+\frac{\partial}{\partial y}(\bar{\tau}_{yy}-\rho\overline{u'_y u'_y})+\frac{\partial}{\partial z}(\bar{\tau}_{zy}-\rho\overline{u'_y u'_z})+\rho Y \tag{4-20b}$$

z 分量：

$$\rho\left(\bar{u}_x\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial x}+\bar{u}_y\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial y}+\bar{u}_z\frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z}\right)=-\frac{\partial \bar{p}}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\tau}_{zx}-\rho\overline{u'_z u'_x})+\frac{\partial}{\partial y}(\bar{\tau}_{zy}-\rho\overline{u'_y u'_z})+\frac{\partial}{\partial z}(\bar{\tau}_{zz}-\rho\overline{u'_z u'_z})+\rho Z \tag{4-20c}$$

由上可见，当人们将流体动量方程中变量取时均值时，式(4-20)中多出一些脉动项，即由脉动量组成的各项，这些项即是所谓的雷诺应力项，如 x 方向有：

$$\begin{aligned}\overline{\tau^r_{xx}}&=-\rho\overline{u'_x u'_x}\\ \overline{\tau^r_{yx}}&=-\rho\overline{u'_y u'_x}\\ \overline{\tau^r_{zx}}&=-\rho\overline{u'_z u'_x}\end{aligned} \tag{4-21}$$

三维时雷诺应力矩阵为：

$$\begin{bmatrix}\overline{\tau^r_{xx}} & \overline{\tau^r_{yx}} & \overline{\tau^r_{zx}}\\ \overline{\tau^r_{xy}} & \overline{\tau^r_{yy}} & \overline{\tau^r_{zy}}\\ \overline{\tau^r_{xz}} & \overline{\tau^r_{yz}} & \overline{\tau^r_{zz}}\end{bmatrix} \tag{4-22}$$

其意义可以参见任何一本传递过程教科书或流体力学。

因此，上式可总结写为

$$\rho\frac{\mathrm{D}\bar{u}}{\mathrm{D}t}=-\nabla p-\nabla\cdot\bar{\tau}^{(l)}-\nabla\cdot\bar{\tau}^{(r)}+\rho\bar{F} \tag{4-23}$$

作为结语必须指出，只有将流体的动量、热量、质量方程中各变量时均化才能用于湍流过程，这就是为什么要强调平均的原因。

4.2.3 能量方程的时均化

一般在层流中热量传递是以 Fourier 定律描述的，即

$$\frac{DT}{Dt}=\alpha\nabla^2T \tag{4-24}$$

式中，导温系数 $\alpha=k/C_p\cdot\rho$，但是在湍流运动中的能量传递，在密度 $\rho=$const，定压比热容 $C_p=$const 以及导热系数 $k=$const，并忽略热损失情况下，可以下式描述：

$$\rho C_p\frac{D\overline{T}}{Dt}=k\nabla^2\overline{T}-\rho C_p\nabla\cdot[\overline{T'\boldsymbol{u}'}] \tag{4-25}$$

式(4-25)与式(4-24)殊相类似，只不过式(4-25)中多了一项湍流能量通量，并且瞬时温度被时均温度所代替。这就是时均化后的能量方程。

4.2.4 质量守恒方程时均化

在前面(第 2 章 2.2)就介绍过的多组分系统质量守恒方程

$$\frac{D\rho_i}{Dt}=D_i\nabla^2\rho_i+R_i,\quad i=1,2,\cdots,N \tag{4-26}$$

此式只能适用于层流运动，对湍流过程中选定组分 i 的质量守恒方程为：

$$\frac{D\overline{\rho}_i}{Dt}=-\nabla\cdot\overline{j}_i-\nabla\cdot(\overline{\rho'_iu'_i})+\overline{R}_i \tag{4-27}$$

比较两式可以看出，式(4-27)中等号右边第一项尚未运用 Fick 定律变换，第二项为多出来的湍流项，且每项均已时均化。

现举例说明各种扩散体系模型的发展过程。

例 4-1 化学反应器——填充床和空管

描写物料在湍流区分散的基本方程是时均化后的多组分系统质量守恒方程[式(4-27)]。它可以重写成如下形式：

$$\frac{\mathrm{D}\overline{\rho_i}}{\mathrm{D}t}=\nabla\cdot[\mathrm{D}^{(\mathrm{l})}\nabla\overline{\rho_i}]+\nabla\cdot[D^{(t)}\nabla\overline{\rho_i}]+\overline{R_i} \quad (4\text{-}28)$$

忽略分子运动项，则剩下的未知参数为湍流扩散系数 $D^{(t)}$，速度 $\boldsymbol{u}$。现有湍流理论无法确定这些参数，因为一般说来，流场既不是均匀湍流也不是各向同性。比如 $\mathrm{D}^{(t)}$，其值依赖于位置和方向且与局部平均速度有关，从数学上看，它是一个二阶张量，并非标量，它有 9 个分量，即使将所选主轴与坐标轴重合，仍然有 3 个非零分量(对角线)，只能由实验来确定。

只要作如下假设，可使方程进一步简化。这些假设是：

系统对称允许用柱坐标，为此则仅需两个扩散系数就足以描述系统而且模型参数退化到只与径向以及流体速度有关。

进一步，扩散系数可以认为与位置无关，引进平推速度分布，则模型变为平推流模型，仅须三个常量参数：D_L、D_R 和 $\bar{u}$。

最终，在径向浓度变化可以忽视的情况下，可以得到轴向活塞流模型，式(4-28)退化为仅有两参数的形式如下：

$$\frac{\partial\overline{\rho_i}}{\partial t}+\bar{u}\frac{\partial\overline{\rho_i}}{\partial x}=D_L^{(t)}\frac{\partial^2\overline{\rho_i}}{\partial x^2}+\overline{R_i} \quad (4\text{-}29)$$

按照常规理论，对理想类型的湍流，这些湍流系数可以由统计理论预测，但是现仍办不到。

现考虑一维湍流扩散，在均匀湍流中，湍流扩散系数与位置无关，仅是时间的函数。按照分子布朗运动的类似，涡流扩散可以 σ_x^2 值来定义，即

$$D_x^{(t)}=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_x^2 \tag{4-30}$$

于是，它可以与流体质点的空间相关联。进一步努力去找出一个可以表达变量 σ_x^2 与时间 t 的公式，这当然要在统计分析的基础上去解决。

一般湍流脉动并非完全混乱无序，物质质点的两个脉动速度 $u(t)$ 和 $u(t+t')$ 的相关程度可以很好地用自相关函数表达：

$$R(t')=\frac{\overline{u(t)u(t+t')}}{\bar{u}^2} \tag{4-31}$$

式中 $\bar{u}$ 是时均速度，自相关系数 $R(t')$ 在区间 $(-1,1)$ 取值，即 $R(t')\in(-1,1)$。

自相关函数有下列特殊意义：

$|R(t')|>0$ 表示相关程度；

$R(t')=0$ 表示不相关；

$|R(t')|=1$ 表示存在着一个函数关系。

湍流积分尺度定义为两速度之间最长相关时间的度量，现可以写为

$$\Gamma=\int_0^{\infty}R(t')\mathrm{d}t' \tag{4-32}$$

而式(4-30)引入的变量 $\sigma_x(t)$ 与自相关函数之间的关系为：

$$\sigma_x^2(t)=2\bar{u}^2\int_0^t(t-t')R(t')\mathrm{d}t' \tag{4-33}$$

虽然现阶段自相关函数的正确解析形式尚未可知，但如湍流的惯性周期远小于扩散尺度，则有：

$$\lim_{t'\to 0}R(t')=1 \tag{4-34}$$

故由式(4-33)可得

$$\sigma_x^2(t)=\bar{u}^2t^2 \tag{4-35}$$

代入式(4-30)则可得

$$D_x^{(t)}=\overline{u}^2 t \tag{4-36}$$

此式表明惯性周期内，$D_x^{(t)}$ 与时间 t 成正比。

在长湍流扩散时间，流体质点间相关不存在，即

$$\lim_{t'\to\infty} R(t')=0 \tag{4-37}$$

则式(4-33)给出：

$$\sigma_x^2(t)=2\,\overline{u}^2 t\Gamma+\text{const} \tag{4-38}$$

因而扩散系数变为：

$$D_x^{(t)}=\overline{u}^2\Gamma \tag{4-39}$$

此式说明湍流扩散在一个长扩散时间条件下与时间变量无关，显然流体质点此时呈现完全混乱运动，因此式(4-39)也可以描述布朗质点的扩散。

例 4-2 球形质点混乱运动时的扩散系数

对于球形质点的特殊情况，Einstain 曾用 stockes 定律和能量均布原理计算过湍流积分尺度 Γ：

$$\Gamma=\frac{kT}{\overline{u}^2 6\pi\mu R} \tag{4-40}$$

代入式(4-39)，则此时的扩散系数可以立即得到，即

$$D_x^{(t)}=\frac{kT}{6\pi\mu R} \tag{4-41}$$

式中，R 为质点的半径，k 为 Boltzmann 常数。

从上述内容可以看出，湍流统计理论只有很小的帮助，这是因为还缺乏完整的知识。这种状态促使人们作另外的尝试以建立涡流系数。比如，壁湍流中 Prandtl 混合长等。

4.2.5 均匀湍流

从它在空气污染中重要应用的观点出发，写上这一节自由湍流对大气弥散的影响是必要的。给定大气弥散的状况，考

查流体中粒子的浓度分布，这些粒子是从一个固定源进入平均速度不变的均匀流动场的。

粒子分散在大气中最初是由于空气运动所致，分子运动导致的扩散通常不予考虑。和空气速度脉动的结果一样，粒子浓度被认为是一个无规量，为了工程计算，引入浓度平均值的概念是有用的。两种典型情况分述如下：

(1) 物质粒子 m，在时间 $t=0$ 和位置 r 的瞬时点源所释放，经过一段时间 t 后，粒子发生扩散并且其在均匀流场中的平均浓度为：

$$\overline{\rho_i}(\boldsymbol{R},t)=mp(\boldsymbol{R}/r,t) \tag{4-42}$$

注意，$p(\frac{\boldsymbol{R}}{r},t)$为特殊的密度函数，并且 $\boldsymbol{R}$ 决定粒子在时间 t 的位置。

(2) 在不变的平均速度$\overline{U}$(与 x 轴共线)的流动中连续点源扩散。因为湍流运动扩散是一线性现象，平均浓度可简单地由瞬时浓度场叠加得到：

$$\overline{\rho_i}(\boldsymbol{R})=w\int_0^{\infty}p(x-ut,y,z/r,t)\mathrm{d}t \tag{4-43}$$

式中 p 是概率密度函数。

确定平均浓度分布用式(4-42)或(4-43)都必需知道整体的概率密度函数。在以前统计理论说明中并未给出。

作为尝试解决问题，考虑两种极限情况：

(1) 长扩散时间(流通时间超过特性时间 Γ)，后继质点浓度的脉动主要表现为无序。建议用高斯分布近似描述这一物理现象。

(2) 非常短的扩散时间(小于特性时间 Γ)，概率函数正比于速度分布，也是高斯分布。

由于两种大气中质点分散极限情况清楚地表明浓度分布

可以考虑为高斯公式，有理由假设介质扩散时间可用高斯分布来近似。

用高斯分布函数结合两个方程〔式(4-42)、(4-43)〕可以得到一个平均浓度的表达式：

$$\overline{\rho_i}(\boldsymbol{R})=\frac{w}{(2\pi)^{3/2}}\int_0^{\infty}\exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_{xx}^2}-\frac{y^2}{2\sigma_{yy}^2}-\frac{z^2}{2\sigma_{zz}^2}\right)\frac{\mathrm{d}t}{\sigma_{xx}\sigma_{yy}\sigma_{zz}} \tag{4-44}$$

解式(4-44)需要知道各变量与时间的函数关系，这将在以后的大气污染中举例说明。

在结论中必须指出，这种算法的优越性是，解一个给定的问题可以不用甚至不必写出其相应的微分方程。为了引起兴趣，对连续点源分散条件下的时均守恒方程提供如下结果：

$$U\frac{\partial\overline{\rho_i}}{\partial x}=D_{xx}^{(t)}\frac{\partial^2\overline{\rho_i}}{\partial x^2}+D_{yy}^{(t)}\frac{\partial^2\overline{\rho_i}}{\partial y^2}+D_{zz}^{(t)}\frac{\partial^2\overline{\rho_i}}{\partial z^2} \tag{4-45}$$

4.3 面积平均

一个值得注意的简化描述方程的方法，在因变量仅一维有显著变化的条件下就是面积平均。量 Q 的面积平均值定义为：

$$\tilde{Q}=\frac{1}{A}\iint_A Q\mathrm{d}A \tag{4-46}$$

瞬时变量和时均量可以取面积平均。这种积分平均的优越性仅有一个空间变量留在基本守恒方程中时是非常明显的。

任何一个给定的传递过程，其中因变量在某一个方向上的变化比另外两个方向上更显著，则可以说：式(4-46)所定义的平均过程是对微观方程中每一项都进行平均。这种特别的方法可以包括不太麻烦的积分。所幸的是一个直接平衡的方

法是存在的，它简单易行并且能得到相同的结果。这将在本书下一章 5.4 中详细讨论。

由于一般形式的基本守恒方程的面积平均没有太多的趣话，所以此处仅给一个例题说明方法及其将来的远景。

例 4-3 固体中的热传导

考虑一个圆柱体连接两个不同温度 T_1 和 $T_2(T_1>T_2)$的物体。给定一个环境温度 T_A 和圆柱直径 $2R$，从圆柱体向周围空气的传热系数 h(常量)以及导热系数 k(常量)。试开发一个数学模型可以解出圆柱内的温度分布。注意圆柱长度远远大于直径(参见图 4-1)。

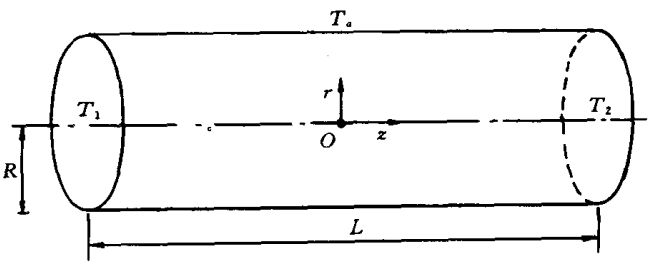


图 4-1 圆柱体导热

热量在圆柱体内部作两个方向(z 和 r)传导。在 θ 方向上无热传导。由于传递的能量只是热量，并且因为系统是稳态、静止的，于是圆柱坐标的能量方程〔式(2-46)〕可以简化为：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}=0 \tag{4-47}$$

以及其边界条件为：

$$T(r,0)=T_1 \tag{4-48}$$

$$T(r,L)=T_2 \tag{4-49}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(0,z)=0 \tag{4-50}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(R,z)=-\frac{h}{k}[T(R)-T_a] \tag{4-51}$$

根据定义式(4-46)对式(4-47)取面积平均：

$$\frac{1}{\pi R^2}\int_0^R 2\pi r\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)\right]\mathrm{d}r+\frac{1}{A}\iint_A\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\mathrm{d}A=0 \tag{4-52}$$

式中第一项可以作如下重排：

$$\frac{1}{\pi R^2}\int_0^R 2\pi r\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)\right]\mathrm{d}r=\frac{2}{R^2}\int_0^R \mathrm{d}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) \tag{4-53}$$

此式右边的积分项可用边界条件式(4-50)、式(4-51)加以评价，或式(4-52)中第二项则可按定义式(4-46)处理，于是可得：

$$\frac{\mathrm{d}^2\tilde{T}}{\mathrm{d}z^2}=\frac{2h}{Rk}[T(R)-T_a] \tag{4-54}$$

面均边界条件为：

$$\tilde{T}(0)=T_1 \tag{4-55}$$

$$\tilde{T}(L)=T_2 \tag{4-56}$$

4.4 局部体积平均

对复杂几何形状的系统，如填料塔和多孔介质，传统的推导描述方程的方法不可能利用。但是，利用一个不同的方法可以得出平均意义上的结果，即微分守恒方程在局部体积上取平均，此体积包括固相和液相，作如下的定义：

$$\tilde{\tilde{Q}}=\frac{1}{V}\iiint_v Q\mathrm{d}V \tag{4-57}$$

由于在 Slattery 的书里[5]对此有详细的叙述，有兴趣的读者可以参考，因此，此处就不再展开了。

符 号 说 明

A 面积[m^2]

D 扩散系数[m^2/s]

F 外力[N]

j 分子扩散通量[$kg/(s \cdot m^2)$]或[$kmol/(s \cdot m^2)$]

p 压力[Pa]

Q 任意量[-]

R 反应生成物质量流量[kg/s]或位置或球半径[m]

T 温度[K]

t 时间[s]

U，u 速度[m/s]

V 体积[m^3]

w 质量速度[kg/s]

希腊字母

α 导温系数[m^2/s]

Γ 湍流积分尺度[s]

μ 牛顿流体粘度[Pa·s]

ρ 密度[kg/m^3]

σ 均方差[-]

τ 剪应力[Pa]

上标

l 层流的

t 湍流的

下标

i 组分的

x x 方向的

y y 方向的

z z 方向的

参 考 文 献

[1] Stanialav J F. Mathematical Modeling of Transport Phenomena Process. Ann Abor Science, 1982

[2] Denn M M. Process Fluid Mechanics. New Jersey: Prentice Hall, Inc, 1980

[3] Hinze J D. Turbulence. New York: McGraw-Hill, 1959

[4] Csanady G T. Turbulent Diffusion in the Environment. New York: D Reidel Publishing Company, 1973

[5] Slattery J C. Momention, Energy and Mass Transfer in Continus. New York: McGraw-Hill, 1972

第5章　传递过程模型建立方法

5.1　前　　言

在本章开头必须着重指出，迄今尚无一完整的建立传递过程数学模型的方法，几乎所有的情况都要求各个击破。当然，某些一般性的值得遵循的指南还是有的(参见第1章1.3)。本书所建议的步骤不能说对各种问题都很重要，要因题而异，灵活运用，希望这种建模方法将对读者学习建模技巧能有所帮助。

本书进一步建议建立数学模型应分三个步骤：问题描述，初步分析以及模型开发。下面对每一个步骤作简要说明，并用各种例题说明其重要的前景。

5.2　过 程 描 述

首先，必须有过程及设备的描述，对所论过程收集其信息、已有的数据和特性，以及其突出的前景。

对任何一个给定的过程，根据其建模的目的，都可以建立各种各样的模型。每一个模型都反映出建模人的兴趣所在。一个投资商的模型显然与设计工程师的模型不同；而一个过程或设备操作者所需模型与数学家的模型也不会一样。因此，模型的形式和内容强烈地依赖于建模人的兴趣。

本书中的模型严格地以着眼于较好地理解过程的机理为追求目标。其兴趣在于获得模拟一个给定传递过程以预测未

来的能力，预测所论量在情况改变时的变化以及设计和操作变量对产品特性的关系，任何变量之间关系的定量化包括理论上的关系通常都是有用的。其结果可用来得到特殊性质的产品，或者提高过程效率以及找出限制产率的因素。

以上所有的已知信息在初步分析之前组织好，通常此信息与模拟的目的是相同的，即输入和输出量。必要时可以将过程化成几个较小系统加以考虑。

5.3 初步分析

诚如上述，一个传递过程的数学模型构造了输入和输出量间的函数关系，而且是建立在物理化学原理的基础之上。感兴趣的量是或者不是与守恒方程中的变量相一致。如果不相同，那么首先必须建立起此两类变量之间的关系。

初步分析中最重要的步骤是：(1)模拟水平的确定；(2)简化假设；(3)系统再细分。

5.3.1 第一步——确定模拟水平

关于模拟水平，建议作如下考虑：

(1) 哪一类的信息希望模型提供？确定分析的目的就决定模拟水平。例如，心血管流动表明在不同水平的模型对给定的分析目的都一样有用。

(2) 现有信息的完整性和精确性。给定的信息必须在同一个或在一个比模型方程本身更深一层的水平。

(3) 传递过程的复杂性。常常遇到的问题是一个本质复杂而对其物理-化学原理又不完全了解。在这种情况下，常先作一个简单模型，它仅仅含有主要因素，这样的模型既能提供一个有价值的解(根据问题的目标)，又能提出其基本前景是否能成功，然后再开发一个更加高级的模型。

5.3.2 第二步——考虑简化假设

初步分析中一个重要步骤就是引入简化假设。这种考虑与决定模拟水平密切相关，有时在它们中间难于区分。一般说来，在数学简化与描述方程的近似程度之间，有一个折衷，必须谨慎处理。判断能力和经验在此步骤中将起很大作用。无原则可以给出，只能讨论一些典型例子。

(1) 假设守恒方程的重要性，一个数学描述已包含在守恒方程之中，此方程对应于传递过程，它确实对给定的系统是重要的。

(2) 假设基本守恒方程中相对重要的独立变量，减少原来偏微分方程中的独立变量可以达到简化目的，这样，它可以变为常微分方程，甚至代数方程。例如，如果给定的因变量在一维、二维或者三维空间变化不大，那么就可以只求二维或一维的积分。

(3) 本构方程的假设，比方，对复杂流体常简化假设它为一线性剪应力-应变关系，即牛顿流体。

(4) 对传递机理的简化假设，在一个系统中并不是所有模式的传递都会发生，略去不重要的传递模式，就是对描述方程的重要简化。例如，我们面对的问题里包括流体流动，重要的是要比较粘性力与惯性力的作用，一个有名的标准就是 Re 准数。如果 $Re \ll 1$，是爬流，则可略去守恒方程中的惯性项，偏微分方程得到了线性化。反之，$Re \gg 1$，惯性力占统治地位，则可略去其粘性项，于是，降低了微分方程的阶数。又如，在层流热质传递中分子扩散为主，略去对流项；湍流时则反之，略去分子扩散。

5.3.3 第三步骤——系统再细分

当人们分析一个复杂系统时，还有另外必须注意之点，即

有时将大系统分成几个较小的子系统，可能建模相对容易些。如果考虑再细分的话，一个系统分解成几个子系统，这些子系统有可能不能保持其原有的物理本质。虽然不能定出分解的规则，但以下两个原则必须注意：

（1）子系统必须与给定系统的物理化学本质一致。如果不遵守这个原则，任何子系统的模型将退化为曲线拟合，这是有局限性的经验方法，参见第 6 章。

（2）再细分过程中信息下游必须保持住。一个子系统的输出将成为下一个子系统的输入。例如，流体流过固体形成边界层时，可分为两个区域，即主流区和边界层区，前者速度为常数(势流理论)，后者的特征为有显著的速度梯度。

例 5-1 心血管系统的流动模型

总结本节初步分析，仅以心血管系统流动模型化为例，说明各种水平描述的用处。

心血管系统主要为下列三部分组成：动脉、微循环(毛细管)以及静脉网络。因此，其特点为：

（1）各分网络血管的复杂的几何图形。

（2）脉动流动的特殊特征和管壁弹性。

（3）血液的非牛顿性质。

人体器官数学模型化的目的是了解其生理函数，以便为诊断提供一些指导。鉴于心血管系统的复杂性，事实上不可能得到一个完整的真实模型。但是，也不必受此困扰，因为甚至相对简单的模型对某种特殊目的都是有价值的。

似乎指导性意见是从最低水平的描述开始，再继续发展为更精确的模型。用数学语言表达即首先近似为稳态和瞬变集中参数描述，然后用带有或不带有非线性特性的单参数描述模型。

纯阻力模型

此系统作为一个整体，考虑为一个以圆周阻力为特征的实体。心血管流动假设为无脉动稳态流动，开始时不考虑重力。压力—流量之间关系可以由宏观运动方程得到，此时为：

$$F_{\text{阻力}}=\Delta(\rho A) \tag{5-1}$$

又管壁上的阻力，血液假设为牛顿流体时，近似为

$$\tau \cong \mu \frac{u}{L} \tag{5-2}$$

式中，L 为特征长度，u 为平均速度。

因此，阻力可以直接与血流量联系起来，假设动脉和静脉末端相同。根据上述考虑，可以写出压降如下：

$$\Delta p=QR \tag{5-3}$$

式中，总流动阻力 R，包括几何、弹性和流变因素的影响。式(5-3)表达循环系统一个简单的阻力概念，并且是任何脉管系统有用的单参数模型。它的主要用途是血管流变学研究中生理状态的临床指示以及孤立器官渗透实验中壁膨胀性的测定。

此模型可以加以改进，考虑惯性效应和血液在动脉中的周期存贮。因此，式(5-3)可以改写为：

$$\Delta p=\beta_1 \mu Q+\beta_2 Q^2 \tag{5-4}$$

式中第一项表示粘性影响，第二项表示惯性效应(β_1 和 β_2 是依赖于系统几何形状的常数)。

可以在模型中压力项引入时间变量以描述动脉中血液的存贮，这样的模型和纯粹阻力模型处于同一描述水平，它就是常说的集中参数模型。

集中参数模型

为了计算方便，循环系统分为两个子系统：

(1) 循环和毛细管子系统，它可以用上述纯阻力模型予以描写。

(2) 动脉子系统，可用一个弹性室予以模化。对此子系统来说，血液的质量衡算(假设不可压缩)可以写成下式：

$$Q_{入}=Q_{出}+\frac{1}{k}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} \tag{5-5}$$

式中 $Q_{入}$，$Q_{出}$——进入和流出的流率；

k——室的弹性模量；

p——系统压力。

输出项 $Q_{出}$ 描述血液流经循环系统，仿照式(5-3)以流动阻力表示之，于是式(5-5)变成：

$$Q_{入}=\frac{p}{k}+\frac{1}{k}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} \tag{5-6}$$

两个描述方程[式(5-3)和(5-6)]即为集中参数模型。式(5-6)是在式(5-3)基础上改进而成的，它通过与时间有关的压力项提供了周期性血液存贮的描写。

上式可以用于网状短动脉系统，如鱼和鸟类。另外，一个潜在的用处为分析心泵辅助设备，因为那里波动不重要，更重要的是体积和弹性参数随时间的变化。原则上说，集中参数模型是不能描述波的传播的。

线性分布模型

更详细的描述可以从参数分布模型得到。它允许研究波的传播以及与空间和时间有关的现象。在下列近似条件下，可以开发一个特殊的模型：

血液自然被认为是牛顿流体，假设在一个圆形固体壁面流道中作周期层流运动。固壁的假设意味着没有流道需要的动力学方程。惯性效应予以忽略，因为实验证明，平均流速

远小于波动速度。这一简化使得运动方程中的非线性不予考虑，故模型变为线性。由于流道的长度假设比起直径大得多，故速度分量 $u_Z(r,t)$，更显重要。

在所设条件下，柱坐标的 Navier-Stokes 方程简化为：

$$\rho\frac{\partial u_z}{\partial t}-\frac{\mu}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial u_z}{\partial r}\right)=-\frac{\partial p}{\partial z} \tag{5-7}$$

不过实验证明，上式中各项在流道横断面上的变化不重要，使得它可以考虑面积平均：

$$\frac{\rho}{A}\int_0^A\int\frac{\partial u_z}{\partial t}\mathrm{d}A-\frac{\mu 2\pi}{\mathrm{A}}\int_0^{D/2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\mathrm{d}r=-\frac{1}{A}\int_0^A\int\frac{\partial p}{\partial z}\mathrm{d}A \tag{5-8}$$

积分的第二项，利用壁面上牛顿流体本构关系可以很容易化简：

$$\int_0^{D/2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\mathrm{d}r=-\frac{D}{2}\frac{\tau_w}{\mu} \tag{5-9}$$

因此，式(5-8)可以写成面均量：

$$A\frac{\partial\tilde{u}}{\partial t}+\frac{\pi D\tau_w}{\rho}=-\frac{A}{\rho}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial z} \tag{5-10}$$

用壁面上剪应力的表达式：

$$\tau_w=\frac{8u_z\mu}{D}f(\alpha) \tag{5-11}$$

改进式(5-10)，此处 $f(\alpha)$是频率参数$\frac{D}{2}\left[\frac{\omega\rho}{\mu}\right]^{\frac{1}{2}}$的函数，并且有如下特性：

$$\lim_{\alpha\to 0}f(\alpha)=1 \tag{5-12}$$

再引入体积流量 Q，于是式(5-10)可以重排如下：

$$L\frac{\partial Q}{\partial t}+RQ=-\frac{\partial\tilde{p}}{\partial z} \tag{5-13}$$

式中，水力阻力 R 定义为：

$$R=\frac{128\mu}{\pi D^4}f(\alpha) \tag{5-14}$$

以及系数 L 是：

$$L=\frac{4\rho}{\pi D^2} \tag{5-15}$$

因此，式(5-13)可以得出如下形式的解：

$$Q=\frac{\frac{\partial \tilde{p}}{\partial z}}{R+i\omega L} \tag{5-16}$$

式中，i 为虚数单位。

线性分布模型对动脉流动的研究非常有用，特别适用于速度和压力脉动的过渡区。由于排除了非线性效应，所以线性理论不能用于确切描述循环系统中压力和流动之间的关系，因为那里存在着很多非线性问题。

非线性分布模型

非线性效应起源于非线性壁面特性，如对流加速和断面因压力而改变。当模拟循环系统中波形逐渐变化时，非线性现象必须考虑。在给定的例题中，大动脉的渐缩假设是非线性的主要来源。压力和速度假设仅在轴向改变，可以处理成为面均量。因此，基于物质和动量守恒的描述方程必须也算作随时间和空间而变化的面积变量。对所论情况，连续性方程和运动方程变成：

连续性方程：

$$\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\tilde{u}A)=0 \tag{5-17}$$

运动方程：

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{A}{\rho}\tilde{p}+A\,\tilde{u}^2\right]=\frac{\tau_w \pi D}{\rho}+\frac{\partial}{\partial t}(A\,\tilde{u}) \tag{5-18}$$

可是这一对方程中有 3 个因变量($\bar{p}$,A 和 $\bar{u}$)，必须增加一个方程才能求解，此方程可以按弹性壁的本构关系补充进去。同样，一些关于摩擦阻力的近似表达式也需补充。

此方程的解析解按非线性理论是没有的，但是数值解是行得通的。

5.4 模 型 开 发

一个数学模型基本上有二个开发步骤：

(1) 描述方程是靠基础物理原理写成，方程的形式可以假设为偏微分方程、常微分方程或代数方程。

(2) 解描述方程可以得出输入量和输出量之间的定量关系(也称模型方程)。

本书中所说数学模型绝大部分是从基本守恒方程或者其相当的积分平均式推导的。但是，模型开发战略上依赖于目的和所论过程的前景。一般说来，分析的目的既要找出基本变量在时间或空间上的分布，也要定量感兴趣的输出量和操作变量以及系统参数之间的关系。在上述两种情况下，模拟均包含了简化基本变化方程，但是在后一种情况下，目标首先必须写成数学项，这种常常基于感兴趣量的物理定义的表达式，对分析的目的或建模战略来说是有利的。当基本变量与感兴趣量之间存在着数量上以及完全的函数关系时，画一个计算框图能清晰地表示出各模型方程是怎样联系在一起的，并且也指出了计算的程序(参见以后应用各节)。

5.4.1 写出描述方程

有两个基本方法得到描述方程：

(1) 正规方法　由两步组成：首先，写出相关的守恒微分方程；接下来，利用初步分析中讨论的近似方法使数学方

程转变为模型。正规方法能直接应用，因为它对基本守恒方程能逐步简化。方程中的每一项都按照初步分析中的假设加以考查，只有那些与过程关系有重要关系的各项才保留在描述方程中。正规方法假设所有的具有潜在重要性的因子均予考虑。

(2) 直接方法　从通用的守恒原理出发找出所论量的平衡关系，当使用直接法时一些以前模型化的经验自然有益。首先，选取控制体，这种选择依赖于问题中的空间变量，因为此体积一定在这个特殊方向上无限薄，输出项可以围绕输入量展成 Taylor 级数。由于给定控制体输入和输出面之间相隔微分距离，所以只选级数的前两项加以考虑即可。

以上两种方法的选择依赖于个人的爱好。不过必须指出，使用直接方法在一维和两维是方便的。下例可以说明这一点。

例 5-2　固体中的传热

重新考虑第 4 章中例 4-1

(1) 正规方法，参见第 4 章中 4.3 的例题。

(2) 直接方法，由于温度只在一个方向变化显著，控制体选择 z 方向为无限小的厚度，另外两个方向的尺寸为有限并且与圆柱体相吻合。在所考虑的情况下，$r=R$，$\theta=2\pi$，其控制体为：

$$\Delta V=\pi R^2\Delta z \tag{5-19}$$

热(能)衡算立即可得出如下：

$$q_c(l)\pi R^2=q_c(z+\Delta z)\pi R^2+q_i 2\pi R\Delta z \tag{5-20}$$

式中，q_c 为圆柱内导热热量；q_i 为界面传递热量(热损失于大气)。上式等号右边第一项可以展成 Taylor 级数。由于距离 Δz 假设无限小，故仅须考虑前面两项：

$$q_c(z+\Delta z)=q_c(z)+\frac{\mathrm{d}q_c}{\mathrm{d}z}\mathrm{d}z \tag{5-21}$$

将式(5-21)代入式(5-20)，则可得：

$$\frac{\mathrm{d}q_c}{\mathrm{d}z}=-\frac{2}{R}q_i \tag{5-22}$$

上式中的热通量 q_c 和 q_i 为：

$$q_i=\alpha[T(R)-T_a] \tag{5-23}$$

和

$$q_c=-k\frac{\mathrm{d}\tilde{T}(z)}{\mathrm{d}z} \tag{5-24}$$

所以式(5-24)变为：

$$\frac{\mathrm{d}^2\tilde{T}}{\mathrm{d}z^2}=\frac{2\alpha}{kR}[T(R)-T_a] \tag{5-25}$$

此式与第 4 章中式(4-55)相同，这是因为温度此处也是面均值。

最后一步为解方程，限于本书的目的，对方程的解法不予讨论，必要时可参考任何其他有关的数学书籍。

5.4.2 方程无因次化

为了求解方便，常常将描述方程变换成无因次形式。现在就来对这个问题作一些详细的讨论。变换的明显好处是对方程的数学简化，比方，对参数个数以及在某种情况下，甚至消去变量。解的无因次形式当模型方程实验验证时也是非常招人喜欢的。

习惯上建立一个无因次变量都是凭“直觉”得到的。可是，当缺乏经验或者面对一个新系统，一套方法论必须知道。因此，无因次化的规则或步骤如下：

(1) 新无因次变量 $\overline{V}$，与老变量 V 以及特征值 V^* 和 ΔV^* 的关系定义如下：

$$\bar{V}=\frac{V-V^*}{\Delta V^*} \tag{5-26}$$

（2）按定义式(5-26)将描述方程(包括边界条件)变换成无因次形式。

（3）无因次数群中的特征值通过解代数方程确定，通常令各数群等于 1 或等于 0。

此处有两件事需要考虑：首先，选择常数 1 或 0，取决于能使新的无因次变量归一化。其次，对任何数群确定这两个常数值常有某种任意性。如果两个数群相似(即含有相同的“量”,因变量或自变量)，则其中之一令其等于 0，另一个等于 1。如果一个数群无任何成对者，则令它等于 1。理由如下：如选为零，则必消去此有关项，其结果是方程的本质发生变化并且不再描述同样的物理实质。换句话说，令一个数群等于 1 简化了描述方程以正规形式出现，并且同时保存了它的物理意义。

但是，用上述方法产生的方程组不可能在数学上构造一个行列式系统，为此，有两种情况必将出现：

（1）方程的数目 E 超过未知量的数目 V，其结果是变换后的描述方程仍然含有$(E-V)$个无因次数群。

（2）独立方程的数目达不到未知量的数目，如此一个不希望有的情况将导致独立变量的丢失(相似变换情况)。

例 5-3 考查前述的传热问题(参见第 4 章 4.3 中例 4-2)。其描述方程已经推导出来[参见式(4-55)、(4-56)和(4-57)]。根据式(5-26)构造新的无因次变量：

$$\bar{T}=\frac{T-T^*}{\Delta T^*},\quad \bar{z}=\frac{z-z^*}{\Delta z^*} \tag{5-27}$$

将此代换原方程中的温度 T 和空间变量 Z，则得到下列无因

次形式的微分方程和边界条件。

$$\frac{d^2\overline{T}}{d\bar{z}^2}=\frac{2\alpha}{kR}(\Delta z^*)^2\left[\overline{T}+\frac{T^*-T_a}{\Delta T^*}\right] \tag{5-28}$$

在

$$\bar{z}=-\frac{z^*}{\Delta z^*}\text{时，}\overline{T}=\frac{T_1-T^*}{\Delta T^*} \tag{5-29}$$

在

$$\bar{z}=-\frac{L-z^*}{\Delta z^*}\text{时，}\overline{T}=\frac{T_2-T^*}{\Delta T^*} \tag{5-30}$$

有 5 个无因次数群出现：

$$\underset{\text{(a)}}{\frac{2\alpha(\Delta z^*)^2}{kR}};\ \underset{\text{(b)}}{\frac{T_1-T^*}{\Delta T^*}};\ \underset{\text{(c)}}{\frac{T_2-T^*}{\Delta T^*}};\ \underset{\text{(d)}}{\frac{z^*}{\Delta z^*}};\ \underset{\text{(e)}}{\frac{L-z^*}{\Delta z^*}}$$

注意：数群(b)、(c)以及(d)、(e)构成一对，(a)是单独的。由于仅有 4 个未知量，T^*，ΔT^*，z^*，Δz^*，从 5 个数群中挑出 4 个，用以产生一个系列方程：

$$\frac{T_1-T^*}{\Delta T^*}=1 \tag{5-31}$$

$$\frac{T_2-T^*}{\Delta T^*}=0 \tag{5-32}$$

$$\frac{L-z^*}{\Delta z^*}=1 \tag{5-33}$$

$$\frac{z^*}{\Delta z^*}=0 \tag{5-34}$$

解上述方程[式(5-31)到(5-34)]可得：

$$T^*=T_2,\ \Delta T^*=T_1-T_2,$$

$$z^*=0,\ \Delta z^*=L$$

将这些值代入式(5-28)，(5-29)和(5-30)中，便可得到无因次

描述方程：

$$\frac{\mathrm{d}^2\overline{T}}{\mathrm{d}\,\bar{z}^2}=\frac{2\alpha L^2}{kR}\left[\overline{T}+\frac{T_2-T_a}{T_1-T_2}\right] \tag{5-35}$$

边界条件：$\bar{z}=0$ 时　$\overline{T}=1$

$\bar{z}=1$ 时　$\overline{T}=0$

如所希望的那样，在模型方程中保留了一个无因次数群，$2\alpha L^2/kR$，将上述未知参数值代入式(5-27)可得变换方程：

$$\overline{T}=\frac{T-T_2}{T_1-T_2}\quad 以及\ \bar{z}=\frac{z}{L} \tag{5-36}$$

注意，两个表达式都已成为正规化和无因次化了。

例 5-4　考虑一个牛顿流体圆管层流。在过渡条件下，流体速度仅是径向位置和时间的函数，并且 Navier-stokes 方程退化为下列形式：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial u_z}{\partial r}+\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2}-\frac{1}{\mu}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}=\frac{\rho}{\mu}\frac{\partial u_z}{\partial t} \tag{5-37}$$

反映这种典型流动的边界条件为，首先，流体静止，所以

$$V_z=0\quad 在\ t=0\ 时 \tag{5-38}$$

壁面无滑移：

$$V_z=0\quad 在\ r=R\ 处 \tag{5-39}$$

以及速度剖面对称：

$$\frac{\partial u_z}{\partial r}=0\quad 在\ r=0\ 处 \tag{5-40}$$

新的无因次变量定义如下：

$$\bar{u}=\frac{u-u^*}{\Delta u}\quad \bar{r}=\frac{r-r^*}{\Delta r^*}\quad \bar{t}=\frac{t-t^*}{\Delta t^*} \tag{5-41}$$

由于 u_z 在所论问题中是唯一的非零分量，所以下标 z 从现在起将予取消。

式(5-37)到(5-40)现在可以用新变量表达：

$$\frac{1}{\bar{r}+\frac{r^*}{\Delta r^*}}\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}}+\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial r^2}-\frac{(\Delta r^*)^2}{\mu \Delta u^*}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}=\frac{\rho}{\mu}\frac{(\Delta r^*)^2}{\Delta t^*}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \tag{5-42}$$

$$\bar{u}=-\frac{u^*}{\Delta u^*} \quad \text{在} \ \bar{t}=-\frac{t^*}{\Delta t^*}\text{时} \tag{5-43}$$

$$\bar{u}=-\frac{u^*}{\Delta u^*} \quad \text{在} \ \bar{r}=\frac{\bar{R}-r^*}{\Delta r^*}\text{处} \tag{5-44}$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}}=0 \quad \text{在} \ \bar{r}=-\frac{r^*}{\Delta r^*}\text{处} \tag{5-45}$$

于是，出现了 6 个无因次数群：

$$\frac{r^*}{\Delta r^*};\frac{R-r^*}{\Delta r^*};\frac{t^*}{\Delta t^*};\frac{u^*}{\Delta u^*};\frac{(\Delta r^*)^2}{\Delta r^*\mu}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z};\frac{\rho}{\mu}\frac{(\Delta r^*)^2}{\Delta r^*}$$

(a) (b) (c) (d) (e) (f)

由于未知量的数目也是 6 个，所有的数群(a)～(f)均需要用以产生方程组。数群(a)和(b)是一对，故而常数的选择为

$$\frac{r^*}{\Delta r^*}=0 \tag{5-46}$$

$$\frac{R-r^*}{\Delta r^*}=1 \tag{5-47}$$

数群(e)和(f)必须令其等于 1，因为这是在描述方程中保留相应项 $\mathrm{d}p/\mathrm{d}z$ 和 $\partial \bar{u}/\partial \bar{t}$所必需，以保持过程的特征：

$$\frac{(\Delta r^*)^2}{\Delta u^*\mu}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}=1 \tag{5-48}$$

$$\frac{\rho}{\mu}\frac{(\Delta r^*)^2}{\Delta t^*}=1 \tag{5-49}$$

最后，剩下的数群(c)和(d)令其等于 0，即结果两个特征时间和速度都是零。这种选择是有理由的，因为最初时间为零，以及壁面处的速度也为零：

$$\frac{t^*}{\Delta \tau^*}=0 \tag{5-50}$$

$$\frac{u^*}{\Delta u^*}=0 \tag{5-51}$$

解式(5-46)～式(5-51)的方程组，得未知参数为：

$$r^*=0,\ \Delta r^*=R,\ t^*=0,\ u^*=0,\ \Delta u^*=\frac{R}{\mu}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z},\ \Delta t^*=\frac{\rho}{\mu}R^2$$

将上述各式代入式(5-42)～式(5-45)即产生了无因次形式的描述方程：

$$\frac{\partial^2\bar{u}}{\partial\bar{r}^2}+\frac{1}{\bar{r}}\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{z}}-1=\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{t}} \tag{5-52}$$

$$\bar{u}=0 \quad \text{在}\ \bar{t}=0\ \text{时}$$

$$\bar{u}=0 \quad \text{在}\ \bar{r}=1\ \text{处}$$

$$\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{r}}=0 \quad \text{在}\ \bar{r}=0\ \text{处}$$

于是，所论情况的变换方程为：

$$\bar{u}=\frac{u\mu}{R^2\dfrac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}},\ \bar{r}=\frac{r}{R},\ \bar{t}=\frac{t\mu}{\rho R^2} \tag{5-53}$$

无需再说，这些方程的形式并不是显而易见的，须要花费点力气才能导出。

例 5-5 考虑靠近固体壁面而最初静止的牛顿流体，在某一时刻令其流动，目的是求流体在过渡区的速度剖面，$u_x(y)$。

对给定的问题 Navier-stokes 方程变为：

$$\frac{\partial u_x}{\partial t}=\frac{\mu}{\rho}\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \tag{5-54}$$

以及边界条件

$$u_x=0 \quad \text{在}\ t=0\ \text{时}$$

$$u_x=V \quad \text{在}\ y=0\ \text{处}$$

$$u_x=0 \quad \text{在 } y\to\infty \text{处}$$

无因次数群按通则定义为：

$$\bar{u}=\frac{u-u^*}{\Delta u^*};\ \bar{t}=\frac{t-t^*}{\Delta t^*};\ \bar{y}=\frac{y-y^*}{\Delta y^*} \tag{5-55}$$

在式(5-54)及其边界条件中，原来的变量被变换式(5-55)中的表达式置换后得：

$$\frac{\partial^2\bar{u}}{\partial\bar{y}^2}=\frac{(\Delta y^*)^2}{\Delta t^*}\frac{\rho}{\mu}\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{t}} \tag{5-56}$$

$$\bar{u}=-\frac{u^*}{\Delta u^*} \quad \text{在 } \bar{t}=-\frac{t^*}{\Delta t^*} \text{时}$$

$$\bar{u}=\frac{u-u^*}{\Delta u^*} \quad \text{在 } \bar{y}=\frac{-y^*}{\Delta y^*} \text{处}$$

$$\bar{u}=-\frac{u^*}{\Delta u^*} \quad \text{在 } \bar{y}\to\infty \text{处}$$

由上述边界条件可得出下列无因次数群：

$$\underset{(a)}{\frac{(\Delta y^*)^2}{\Delta t^*}\frac{\rho}{\mu}};\ \underset{(b)}{\frac{u^*}{\Delta u^*}};\ \underset{(c)}{\frac{u-u^*}{\Delta u^*}};\ \underset{(d)}{\frac{t^*}{\Delta t^*}};\ \underset{(e)}{\frac{y^*}{\Delta y^*}}$$

在此情况下，潜在方程的数目(数群数目)少于未知量的数目，系统不确定，但相似变换是可能的。再一次令各成对数群(a)、(e)和(b)、(c)分别等于 0 和 1 以产生方程组：

$$\frac{y^*}{\Delta y^*}=0 \tag{5-57}$$

$$\frac{(\Delta y^*)^2}{\Delta t^*}\frac{\rho}{\mu}=1 \tag{5-58}$$

$$\frac{u^*}{\Delta u^*}=0 \tag{5-59}$$

$$\frac{u-u^*}{\Delta u^*}=1 \tag{5-60}$$

并且引用和前例同样理由令剩下的数群(d)等于零，则

$$\frac{t^*}{\Delta t^*}=0 \tag{5-61}$$

解式(5-57)～式(5-61)可得：

$$y^*=0$$

$$u^*=0$$

$$\Delta u^*=V$$

$$t^*=0$$

剩下的两个未知参数Δy^*和Δt^*，由式(5-58)可知，只能允许其中的一个为另一个的函数，即比如

$$\Delta t^*=\frac{\rho}{\mu}(\Delta y^*)^2 \tag{5-62}$$

利用此式可以写出变换方程如下：

$$\bar{u}=\frac{u}{v};\ \bar{y}=\frac{y}{\Delta y^*};\ \bar{t}=\frac{t}{(\Delta y^*)^2}\frac{\mu}{\rho}$$

由上式可见，两个自变量均依赖于未定常数Δy^*，为了消灭这种依赖，必须引入一个新无因次变量Φ，它为$\bar{y}$和$\bar{t}$所定义并且与Δy^*无关，在所有能结合的形式中选择如下定义：

$$\Phi=\frac{\bar{y}}{\bar{t}^{1/2}}=\frac{y}{(tv)^{1/2}} \tag{5-63}$$

式中，ν是运动粘度。所论问题解，用新变量表达的形式为：

$$\bar{u}=f(\Phi) \tag{5-64}$$

并且原方程必须重新变换一次。注意$f(\Phi)$是t和y的难解的函数。现在设描述方程呈如下形式：

$$\frac{d^2f}{d\Phi^2}+\frac{1}{2}\Phi\frac{df}{d\Phi}=0 \tag{5-65}$$

其边界条件变为：

$$f=0 \quad \text{在 } \Phi\to\infty\text{时}$$

$f=1$　在 $\Phi=0$ 时

在前述处理中有两点考虑：

函数 Φ 的特殊形式(5-63)具有优越性，因为它的两阶导数 $\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}$ 为零。式(5-65)是常微分方程并且经得起解析解的检验，它代表以原变量书写的式(5-54)的一个巨大的改进。

符 号 说 明

A　面积[m^2]

D　流道直径[m]

F　力[N]

i　虚数单位[-]

k　弹性室模量[$kg/(m^4 \cdot s^2)$]

k　导热系数[$J/(m \cdot k \cdot s)$]

L　特征长度[m]

l　系数[-]

p　压力[$Pa \cdot s$]

Q　流量[m^3/s]

R　总阻力[$kg/(m^4 \cdot s)$]

r　径向位置[m]

T　温度[K]

t　时间[s]

u　平均速度[m/s]

V　体积[m^3]

y　坐标轴[m]

z　坐标轴[m]

希腊字母

α　给热系数[$J/(m^2 \cdot k \cdot s)$]

β　几何系数[-]

μ　牛顿粘度[$Pa \cdot s$]

ν　运动粘度[m^2/s]

ρ　密度[kg/m^3]

τ　应力[Pa]

ω　频率[s^{-1}]

Φ　函数

下标

1　粘性的，1 处的

2　惯性的，2 处的

a　界面的

c　导热的

t　界面传递的

w　壁面的

z　z 方向的

参 考 文 献

[1] Stancslav J F. Mathematical Modeling of Transport Phenomena Processes. Ann Arbor Science, 1982

[2] Middleman S. Transport Phenamena in the Cardiovasculur Systems. New York: Wiley-Interscience, 1972

[3] Smith C L. et al. Formulation and Optimization of Mathematical Models. New York: Internation Textbook Comp, 1970

[4] 江体乾等编著. 基础化学工程(第二版), 上册. 上海科学技术出版社, 1991

第 6 章　经验模型——黑匣子模型

6.1　前　　言

化工中广泛使用经验模型，也叫做准数关联式。如对流传热中的

$$Nu=0.023Re^{0.8}Pr^{0.4}$$

气液传质中的液相传质系数 Stanton 数

$$St=25.1Re^{0.45}Se^{0.5}$$

以及全渗透过程中的

$$Sh=0.44Re^{7/12}\left(Sc\cdot\frac{h}{L}\right)^{1/3}$$

等等不一而足，可以说准数关联式构成了化工的一大特色。化学工程的老师反复说过，这些关联式只能适用于一定范围，不能推广。也就是说，理论无法解决或不明机理的现象用之。当然，它也有理论根据，那就是更一般化的因次论和相似论。近年来又出现了一个研究自相似性的学说——分形学，它已将传统的空间欧氏维数(整数维)推广到分数维，难道它与化工中准数关联式中的分数幂指数毫无联系吗？！不过，目前这种联系尚处在混沌之中，急需讨论、研究。

6.2　因次论分析

物理量分为基本量与导出量两大类，导出量 Q 是可以写为：

$$Q=(a^{\alpha}b^{\beta}c^{\gamma}\cdots)[A]^{\alpha}[B]^{\beta}[C]^{\gamma}\cdots \tag{6-1}$$

式中，A、B、C 均表示基本量，a、b、c 为系数。物理方程中各项总可以表示为如上的多项式，且因次相同，即此多项式对于基本量是齐次的，换言之，物理方程的等号左右两边各项的因次必相等。这就是任何物理方程因次的齐次性。

因次论的基本定理是π定理。

π定理：$N(=n+1)$个物理量的全部函数关系，其中有 m 个基本单位(量)时，可以用 $N-m$ 个无因次数群表示之。用数学语言表达，即

$$Q_0=f(Q_1,Q_2\cdots,Q_n) \tag{6-2}$$

可组成

$$F\left(\frac{Q_0}{Q_1^{\alpha}Q_2^{\beta}\cdots Q_m^{\gamma}},\ \frac{Q_{m+1}}{Q_1^{\alpha_{m+1}}Q_2^{\beta_{m+1}}\cdots Q_m^{\gamma_{m+1}}},\ \cdots,\ \frac{Q_n}{Q_1^{\alpha_n}Q_2^{\beta_n}\cdots Q_m^{\gamma_n}}\right)=0 \tag{6-3}$$

限于本书的目的，这里不拟证明π定理，为了使用上方便起见，此处我们只想对π定理进行一些讨论。

设物理方程

$$f(u_1,u_2,\cdots,u_k,\cdots,u_n,v'_1,v''_1,\cdots,v_1^{m_1},v'_2,v''_2,\cdots,v_2^{m_2},\cdots,v'_n,v''_n,\cdots,v_n^{m_n})=0 \tag{6-4}$$

其中，前 n 个量 u_1，u_2，…，u_n 具有不同的因次，前 k 个量为基本单位(即具有独立因次)，并且

v'_1，v''_1，…，$v_1^{m_1}$的因次与 u_1 相同，

v'_2，v''_2，…，$v_2^{m_2}$的因次与 u_2 相同，

……

v'_n，v''_n，…，$v_n^{m_n}$的因次与 u_n 相同。

量 v 的总数等于

$$m_1+m_2+\cdots+m_n=\sum_l^n m_i \tag{6-5}$$

物理量的总数

$$N=n+\sum_l^n m_i \tag{6-6}$$

按规定，由于 u_{k+1}，…，u_n 为导出量(单位)，故各量的因次为：

$$[u_{k+1}]=[u_1]^{a_1}[u_2]^{a_2}\cdots[u_k]^{a_k}$$

……

$$[u_n]=[u_1]^{p_1}[u_2]^{p_2}\cdots[u_k]^{p_k}$$

并且 $[v_1']=[v_1'']=\cdots=[v_1^{m}]=[u_1]$

……

$$[v_n']=[v_n'']=\cdots=[v_n^{m_{n1}}]=[u_n]$$

于是很容易得出：

$$\left[\frac{u_{k+1}}{u_1^{a_1}u_2^{a_2}\cdots u_k^{a_k}}\right]=1$$

……

$$\left[\frac{u_n}{u_1^{p_1}u_2^{p_2}\cdots u_k^{p_k}}\right]=1$$

$$\left[\frac{v'_1}{u_1}\right]=\left[\frac{v''_1}{u_1}\right]=\cdots=\left[\frac{v_1^{m_1}}{u_1}\right]=1,$$

以及 $\left[\frac{v'_n}{u_n}\right]=\left[\frac{v''_n}{u_n}\right]=\cdots=\left[\frac{v_n^{m_n}}{u_n}\right]=1$。

上式中方括号表示其中量的因次。如引进无因次量，上式变为：

$$\begin{aligned}\frac{u_{k+1}}{u_1^{a_1}u_2^{a_2}\cdots u_k^{a_k}}&=\pi_{k+1},\\ &\vdots\quad\vdots\\ \frac{u_n}{u_1^{p_1}u_2^{p_2}\cdots u_k^{p_k}}&=\pi_n,\end{aligned} \tag{6-7}$$

以及 $\frac{v_1'}{u_1}=s_1'$，$\frac{v_1''}{u_1}=s_1''$，…，$\frac{v_1^{m_1}}{u_1}=s_1^{m_1}$

……

$\frac{v_n'}{u_n}=s_n'$，$\frac{v_n''}{u_n}=s_n''$，…，$\frac{v_n^{m_n}}{u_n}=s_n^{m_n}$。

于是，式(6-4)可改写为无因次数群(即准数)之间的关系：

$$F(\pi_{k+1},\cdots,\pi_n,s_1',s_1'',\cdots,s_1^{m_1},s_2',s_2'',\cdots,s_2^{m_2},\cdots,s_n',s_n'',\cdots,s_n^{m_n})=0 \qquad (6\text{-}8)$$

我们细查上式中的简单同类量之比(或简单准数)的数目 t_s，应为

$$t_s=m_1+m_2+\cdots+m_n=\sum_1^n m_i$$

此式与式(6-5)一致。复杂无因次准数(或数群)的数目 t_π，为：

$$t_\pi=n-k \qquad (6\text{-}9)$$

所以准数的总数 $t=t_\pi+t_s=n-k+\sum_1^n m_i$

将式(6-6)代入式(6-9)，则得：

$$t=N-k \qquad (6\text{-}10)$$

所以简单同类量之比，即简单准数的数目又可表示为

$$t_s=N-n \qquad (6\text{-}11)$$

经过以上的讨论，从理论上就给人们一个指导，当他们无奈建立经验模型(即经验关联式)时，可以依照上述原则检验所建经验模型中的无因次准数的数目是否有误。因为因次论的建模方法，只是在正确分析现象的影响因素的基础之上，进行了逻辑加工而已。

下面举例说明上述讨论的具体应用。

例 6-1 求粘性牛顿流体在圆管内流动时的压强降 Δp。

根据对现象的分析，得知流体速度 u，密度 ρ，粘度 μ，以

及圆管的几何尺寸：直径 d 和长度 l，构成影响压力降 Δp 的主要因素。写成数学语言，即

$$\Delta p = f(u, \rho, \mu, l, d) \tag{6-12}$$

根据因次分析的一套办法[1]可以得出上式变成无因次数群的形式如下：

$$\frac{\Delta p}{\rho u^2} = c\left(\frac{du\rho}{\mu}\right)^{-m}\left(\frac{l}{d}\right)^{\alpha} \tag{6-13}$$

写成惯用的准数，则上式变为：

$$Eu = cRe^{-m}\left(\frac{l}{d}\right)^{\alpha} \tag{6-13a}$$

式中的幂指数 m 和 α 应由实验数据确定，大体上为 $m=0.25$，$\alpha=1$。可见，无因次准数上的幂指数均为分数值。这些均不继续讨论，人们的兴趣仅在于考查一下前述各规则是否有效。

考查：在所论问题中变量的总数　$N=6$，

具有不同因次的量数　$n=5$，

独立因次数目　$k=3$(即 L、M、T)

按照式(6-9)，复杂准数的数目应为：

$$t_\pi = n-k = 5-3 = 2$$

即欧拉准数 Eu 与雷诺准数 Re。

按式(6-11)简单准数的数目应为：

$$t_s = N-n = 6-5 = 1$$

即准数 l/d，两简单同类量之比。

按照式(6-10)，无因次准数的总数应为：

$$t = N-k = 6-3 = 3$$

即 Eu，Re，与 l/d。

有兴趣的读者如想作进一步的了解，详细可参阅文献[2]。

6.3 化工经验模型建模举例

本节用一个例题来说明问题。

例 6-2 粘性指进现象模型的开发

(1) 过程描述

建国以来，我国发现不少大油田，目前正值新疆油田的大发展时期，然而原油均充满于地下岩石的微孔中，微孔的结构形状各异，由大小不同的孔道与空隙交织相联。经过一、二次采油后收率只有50%左右，必须再采用强化采油(EOR)技术，将残留原油再度采出。一般是将一种流体，例如聚合物水溶液，CO_2，泡沫或凝胶，压到地下，驱替出其中粘度较大的原油。当两种流体相接触时，如果 $k_1/\mu_1 > k_2/\mu_2$(k 为渗透压，μ 为粘度，下标 1 为驱替流体，2 为被驱替流体)，则发生一界面不稳定现象，最后能发展成为形如手指状的图案，如图 6-1 所示，称为“粘性指进”现象。

三次采油中人们将驱替流体由左面井中压下，希望它能推动原油从右面井中采出，以增加原油的采收率，如图 6-2 所示意。如果此时发生粘性指进现象，当驱替流体超越原油后，

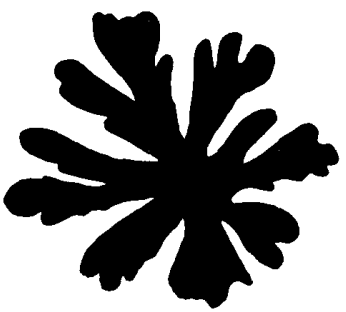


图 6-1 水驱替 PAM

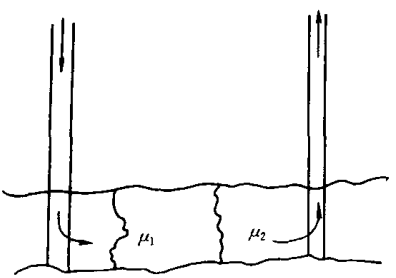


图 6-2 段塞采油示意图

显然采收率就要降低了。

（2）初步分析

由于绝大多数多孔介质不透明，难于观察到真实情况，故实验常采用一个 Hele-shaw 装置，以二维装置模拟多孔介质的三维流动。

如图 6-3 所示，该装置由两块相距约 0.5mm 的透明平板组成，其间充满高粘流体，然后注射进一种低粘流体，通常两流体之间界面张力很大，低粘流体会形成指进图形。但其机理至今尚不清楚，究竟两流体的密度 ρ，表面张力 σ，粘度 μ，以及流体的类型对排出率有什么影响，渗流体力学难于回答，因此决定引用因次分析法建立模型。

（3）模型开发

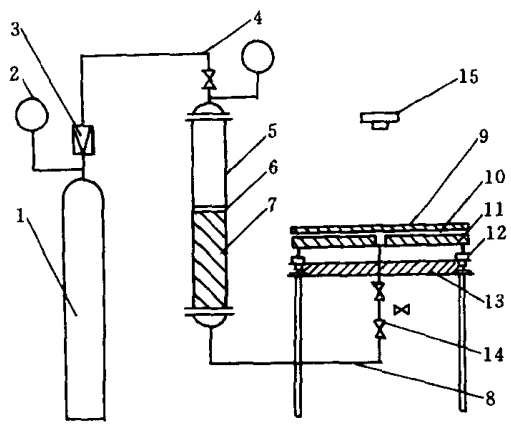


图 6-3　实验流程图

1—氮气瓶；2—氮气压力表；3—氮气阀；4—氮气导气管；5—料液贮存槽；6—活塞片；7—驱替流体；8—驱替流体导管；9—3mm 无机玻璃；10—垫片；11—20mm 有机玻璃(40×40cm)；12—调节螺丝；13—支架；14—调节阀门；15—固定位置的照相机

目标：找出排出率及其与影响因素之间的函数关系。

首先，定义排出率 Se。所谓排出率是指指形图案的总面积与以离圆心最远的指为半径的圆面积之比值百分数。

因次论要求人们对影响过程的因素分析正确。此处，影响因素不外乎两流体的 μ_1，μ_2，表面张力 σ_1、σ_2；密度 ρ_1、ρ_2，注入速度，即流体的流速 u 以及两平板间隙 b。

写成数学语言，即

$$Se=f(\mu_1,\mu_2,\sigma_1,\sigma_2,\rho_1,\rho_2,u,b) \tag{6-14}$$

式(6-14)中各物理量的因次分析如下：

$$[\mu]=[\mathrm{M}\cdot\mathrm{L}^{-1}\cdot\mathrm{T}^{-1}]$$
$$[\sigma]=[\mathrm{M}\cdot\mathrm{L}^{-3}]$$
$$[u]=[\mathrm{L}\mathrm{T}^{-1}]$$
$$[b]=[\mathrm{L}]$$

按照因次分析法，设式(6-14)可以写成幂函数的形式：

$$Se=c\mu_1^{\alpha_1}\mu_2^{\alpha_2}\sigma_1^{\beta_1}\sigma_2^{\beta_2}\rho_1^{\gamma_1}\rho_2^{\gamma_2}u^{\delta}b^{\lambda} \tag{6-15}$$

将上述各量的因次代入式(6-15)，然后对照等号两边同一个基本因次。根据物理方程因次一致性原理，可得出关于 M、L、T 的三个代数方程组。由于此方程中含有 8 个未知量 α_i、β_i、γ_i、δ 和 λ，要想定解必须人为指定 5 个变量为“已知量”，这样一来，就可以得出无因次综合数群。

不过，对本题情况，已知有三对同类量，至少可以组成三个简单准数，因此，取 μ_1，σ_1，ρ_2 为基本变量，则可得：

$$\pi_1=\frac{\mu_2}{\mu_1},\quad \pi_2=\frac{\sigma_2}{\sigma_1},\quad \pi_3=\frac{\rho_1}{\rho_2},$$
$$\pi_4=\frac{\mu_1 u}{\sigma_1}=Ca,\quad \pi_5=\frac{b\rho_2\sigma_1}{\mu_1^{\,2}} \tag{6-16}$$

按照上述 π 定理分析，此时变量总数 $N=8$(因 Se 为数量)，$n=5$，$k=3$。应能组成无因次准数的数目[式(6-10)]

$$t=N-k=8-3=5$$

其中，简单同类量之比的数目(式 6-11)

$$t_s=N-n=8-5=3$$

复杂准数的数目[式(6-9)]

$$t_\pi=n-k=5-3=2。$$

由于 ρ_1/ρ_2 在实验中变化太小，忽略之，可得：

$$Se=f\left(\frac{\mu_2}{\mu_1},\ \frac{\sigma_2}{\sigma_1},\ Ca,\ \pi_5\right) \tag{6-17}$$

式中，Ca 为毛细管准数，π_5 为无名准数。一般化式(6-17)可以写为：

$$Se=A\left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^a\left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\right)^b(Ca)^c(\pi_5)^d \tag{6-18}$$

用计算机拟合实验数据[3]后，可以得出最后形式的方程为：

$$Se=1.66\left(\frac{\mu_1}{\mu_2}\right)^{0.303}\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2}\right)^{1.414}\left(\frac{\mu_1^2}{b\sigma_1\rho_2}\right)^{0.110} \tag{6-19}$$

上式中没有出现代表流动过程中粘性力与表面张力之比的毛细管准数 Ca，这是因为人们发现当 $\mu_1/\mu_2>10^4$ 时，毛细管准数几乎不影响排出率 Se，此结论也得到了同年 Blunt & King[4]发表的论文的支持。

用方程式(6-19)预测值与实验值对比，以检验其正确性。其检验的结果如图 6-4 所示，是令人满意的。

至此，得到了所论问题的经验模型，即式(6-19)。说它是黑匣子模型，因为尽管得到了式(6-19)，人们并不明确过程的真正机理。只是逻辑上进行了一番加工的结果。模型尽管低级，工程上已可应用，从无到有，也不能不算一种进步。

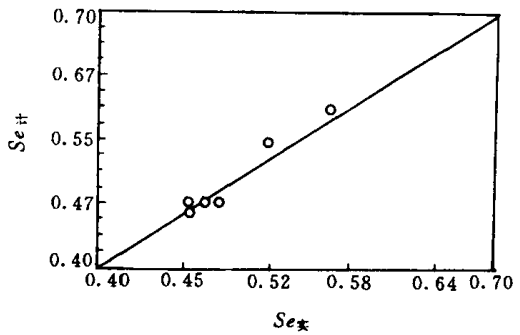


图 6-4　方程预测与实验值的比较

符　号　说　明

b　平板间隙[m]

d　圆管直径[m]

h　高度[m]

k　独立因次数[-]

K　渗透压[Pa]

l　长度[m]

p　压力[Pa]

Q　导出量[-]

N　变量关系[-]

n　不同因次量数[-]

u　流速[m/s]

希腊字母

μ　粘度[Pa·s]

σ　表面张力[N/m]

ρ　密度[kg/m^3]

下标

1　驱替流体的

2　被驱替流体的

无因次准数

$Ca=u\mu/\sigma$　毛细管数

$Nu=\alpha d/k$　努塞尔数

$Pr=c_p\mu/k$　普朗特数

$Re=du\rho/\mu$　雷诺数

$Sh=k_L'd/D_L$　修伍德数

$St=Nu/RePr$　斯坦顿数

Se　排出率[%]

参 考 文 献

[1] 江体乾编著. 化工数据处理. 北京：化学工业出版社，1984

[2] 江体乾. 关于相似理论若干问题的讨论. 科学探索学报，1986(1)：35～41

[3] 何红海，惠元新，江体乾. 高校化工学报，1990，4(2)：101～106

[4] 江体乾，侯望奇. 多孔介质的粘性指进与分形学. 力学进展，1994，25(4)：476～482

第 7 章　传递过程模型

7.1　前　　言

前一章介绍了传递过程模型的建模原则，并进行了初步实践，不过，真正的实践还得从本章算起，因为经验模型仅仅是实验数据的拟合，这在上一章中已详细讨论过。

本章将各种传递过程分门别类予以建模，读者从中可以学习到其方法，或者说入门的途径。不过，在本书第 1 章中已经声明，模型的建立尚处于初级阶段，即所谓："戏法人人会变，各有巧妙不同"。换句话说，仍然是个"艺术"，而不是个"科学"。"艺术"就需要借鉴前人的经验，留心揣摩，才能悟出其真谛。

本章将按化学工程中的经典分类方法，即流动、传热、传质过程，对每一过程均举实例告诉读者建模的步骤，有时还加以讨论，分析其优劣以及改进方法。至于结合实际的应用，则拟另章介绍，以供选择参阅。

7.2　流 动 模 型

7.2.1　密封件在管道中的流动[1]

a）过程描述

密封件管道输送似乎是一种有价值的长输方式，比如煤、粒状物料以及化学药品的输送等。这种输送方式，首先将被输送的物质放入各种形状和大小的密封件内，像火车车箱一

样，开始静止，然后由流经管道和密封件之间空间的流体带动运动。于是，该流体的流速必须超过某一个最小值才能促其运动。习惯上称这样的临界速度为阀值速度。

密封件流动的机理为压力和带动流体作用在密封件表面上的剪应力的共同效应。流速增加到一定水平，此时剪应力超过了静摩擦后，密封件才开始运动。

密封件的流动特性是好几个现象的结合点，其中有的至今尚未明了，这可能是为什么这种输送方式至今尚未商业化的原因。但是，此问题正在进行理论和实验的研究之中。

下面，作为一个理论研究的例子，予以介绍。

从上述简单描述中可以看出阀值速度的重要性，因此，此现象的数学模型即要求开发一个阀值速度与流体物性以及密封件几何尺寸之间的关系。描述方程可从动量守恒原理加以推导。

b）初步分析

下面的分析是建立在假设密封件在管路中的流动，仅须研究一个密封件的流动特性即可的基础之上。这样一来，只需研究这样一段管路就可以了，即轴向尺寸等于一个密封件的长度，如图 7-1 所示。

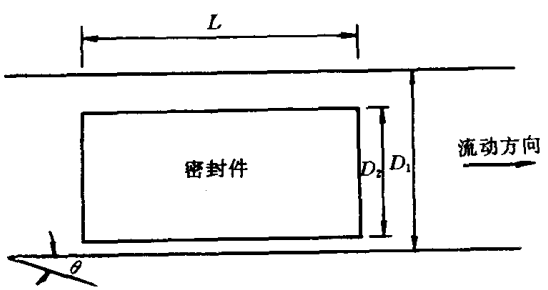


图 7-1　密封件流动分析示意

由于其输入和输出量均具有积分性质，所以，人们考虑宏观水平上的平衡，并假设流体为不可压缩而且是稳态流动。

c）模型开发

阀值速度 V_t，定义为压力降的一个摩擦分量：

$$\left.\frac{\Delta p}{L}\right|_f$$

层流不可压缩流体情况下，可以写为

$$\left.\frac{\Delta p}{L}\right|_f=\frac{2f\rho V_t}{D_t} \tag{7-1}$$

式中，f 为摩擦系数；V_t 为阀值流速。

式(7-1)为分析的起始方程。压力梯度首先以输入量的方式表达，只要在选定的控制体内进行流体的力平衡即可达到目的：

$$\frac{\pi}{4}(D_1^2-D_2^2)\Delta p=\pi(D_1\tau_w+D_2\tau_c)+\rho_l g\frac{\pi}{4}(D_1^2-D_2^2)L\sin\theta \tag{7-2}$$

上式考虑了压力降、重力和摩擦力的平衡。

重排式(7-2)可以得到所希望的压力降表达式：

$$\frac{\Delta p}{L}=\frac{4d(\tau_w+d\tau_c)}{D_2(1-d^2)}+\rho_l g\sin\theta \tag{7-3}$$

式中，$d=D_2/D_1$

式(7-3)右边的第一项可以认为与压力降的摩擦项相等，即等于 $\left.\frac{\Delta p}{L}\right|_f$。因此，结合式(7-1)则阀值速度立即可以确定：

$$V_t=\left[\frac{2d(\tau_w-d\tau_c)}{D_2(1-d^2)}\frac{D_1}{f\rho}\right]^{0.5} \tag{7-4}$$

但是，式(7-4)不是一个真正计算公式，因为它含有三个未知量，V_t、τ_w 和 τ_c，除非已知 τ_w 与 τ_c 和输入量之间的关系。用数学语言来说，就是须要补充另外两个独立关系式，方能达到解三个未知量的目的。

一个是两个剪应力之间的关系，它可近似用于环隙和层流，即

$$\tau_w=\frac{d(2\ln d+1-d^2)}{d^2-1-2d^2\ln d} \tag{7-5}$$

另一个补充方程可由两个力平衡式结合得到，即液相力平衡[参见式(7-3)]以及密封件的力平衡：

$$\frac{\pi}{4}D_2{}^2\Delta p+\pi LD_2\tau_c=\rho_c g\frac{\pi D_2{}^2}{4}L\sin\theta+\xi(\rho_c-\rho)g\frac{\pi D_2{}^2L}{4}\cos\theta \tag{7-6}$$

上式经进一步重排得：

$$\frac{\Delta p}{L}=-4\frac{\tau_c}{D_2}+\rho_c g\sin\theta+(\rho_c-\rho)\xi g\cos\theta \tag{7-7}$$

式中，ξ 为平行于壁面的力的比例系数，由密封件与管壁之间相互作用而造成。比较式(7-3)与(7-7)两个压力降的表达式，即可得出第三个独立关系式：

$$\frac{4(d\tau_w+\tau_c)}{D_2{}^2(1-d^2)}=(\rho_c-\rho)\xi g\cos\theta \tag{7-8}$$

联立式(7-4)、(7-5)和(7-8)，即可得到阀值速度的模型方程：

$$V_t=\left[\frac{(\rho_c-\rho)D_2g\xi(1-d^2)\cos\theta}{2f\rho\phi_2(d\phi_1+1)}\right]^{1/2} \tag{7-9}$$

式中，两函数为

$$\phi_1=\frac{d(2\ln d-d^2+1)}{d^2-1-2d^2\ln d} \tag{7-10}$$

以及

$$\phi_2=\frac{1+d}{\phi_1 d+d} \tag{7-11}$$

式中两函数 ϕ_1 和 ϕ_2，在直径比 d 的整个变化范围内是容易估算的。确定阀值速度，按式(7-9)需要摩擦系数 f 和系数 ξ。前者依赖于流动状态(参见文献[1])。系数 ξ，对于通常金属管表面粗糙度，其值在 0.15 到 0.3 之间变化[1]。

7.2.2 大气污染[2,3]

改革开放以来，我们的环境污染程度随着工业化的增长有所上升，公众关心空气和水的质量。这个问题不能不引起政府和研究人员的关注。

a) 过程描述

不少研究均集中注意释放到空气和水中的污染物质并且加大投入，增添环保设备以控制污染，使其达到国家规定的标准。

科学研究的目标是创造更多的可能性，以预测由已知地点释放的污染物质的浓度分布。

此处，例示一个大气污染问题。

一个典型情况是，污染物质从污染源(烟囱)向大气排放并随空气向下游方向运动。为了符合实际，介质空气考虑为湍流运动并且随之污染物质作湍流扩散。当然，对废弃物质作如此安排不可能丝毫减轻污染，只能稀释，稀释的效率取决于源的几何形状、大气的稳定性、风速以及地面等因素。

显然，为了有效论述大气污染问题，一个能够预测下游污染物质浓度的模型是十分重要的。这样的一个模型，比方说，可用以研究一个流出物是否对环境有害或者探究各种扩散模式、天气条件、接受特性等因素的影响。

在给定的例子中试图开发一个能模拟由污染源不断排放污染物质的数学模型。更进一步说，分析是集中注意于弥散速率以及烟囱高度影响的研究，将其看作环境参数，如风速和湍流强度的函数。

b）初步分析

描述空气污染弥散的目的是想推导一个能够预测各种大气状态下浓度分布的公式。考虑到湍流的本质，时均基本守恒方程必须利用。令人遗憾的是，大气弥散过程的复杂性不允许一个严格的理论解。于是，经验关联式的使用就不可避免。

此模型建立在简化假设的基础上，不过这些假设对此类问题相当典型。设单向风速为常量（另外两个速度分量为零）；均为稳定湍流以及地面假设是一个完全反射体。

c）模型开发

正像在前面第 4 章中湍流讨论过的那样，湍流统计描述的非凡结果是求解一个问题甚至不必推导相应的描述方程，但是，边界条件仍然必须列出。

不失一般性，常选平均风速与 x 坐标方向重合，同时，另外两个速度分量即等于零。如此，对角线以外的扩散张量分量均等于零。

根据第 4 章 2.5 节所述，所论问题的时均连续性方程可以写成下式：

$$\overline{U}\frac{\partial \rho_i}{\partial x}=D_{xx}^{(t)}\frac{\partial^2 \rho_i}{\partial x^2}+D_{yy}^{(t)}\frac{\partial^2 \rho_i}{\partial y^2}+D_{zz}^{(t)}\frac{\partial^2 \rho_i}{\partial z^2} \tag{7-12}$$

已知连续点源的弥散，在不变的平均速度 $\overline{U}$（与 x 轴重合）流场中，因湍流扩散是一线性现象，其平均浓度可以下式表达：

$$\overline{\rho_i}(\boldsymbol{R})=W\int_0^{\infty}p(x-\overline{U}t,y,z/\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}t \tag{7-13}$$

式中，p 是没有平均速度情况下与流体质点协调的概率密度函数；W 是质点的质量。

如设概率密度函数可按高斯分布计算，则结合式(7-13)，其平均浓度可以下式表达：

$$\overline{\rho_i}(\boldsymbol{R})=\frac{W}{(2\pi)^{3/2}}\int_0^{\infty}\exp\left[-\frac{(x-\overline{U}t)^2}{2\sigma_{xx}^2}-\frac{y^2}{2\sigma_{yy}^2}-\frac{z^2}{2\sigma_{zz}^2}\right]\frac{\mathrm{d}t}{\sigma_{xx}\sigma_{yy}\sigma_{zz}} \tag{7-14}$$

平均平方弥散 σ^2 和扩散系数 $D^{(t)}$ 之间的函数关系，对离源长距离的渐近情况可以考虑为：

$$\sigma_{ii}^2=2D_{ii}^{(t)}t \tag{7-15}$$

将式(7-15)中的 σ_{ii}^2 代入式(7-14)随后积分即可得出污染物质平均浓度的表达式：

$$\overline{\rho_i}(x,y,z)=\frac{W\exp\left\{-\frac{\overline{V}}{2D_{xx}}\left[D_{xx}^{1/2}\left(\frac{x^2}{D_{xx}}+\frac{y^2}{D_{yy}}+\frac{z^2}{D_{zz}}\right)^{1/2}-x\right]\right\}}{4\pi\left[D_{yy}D_{zz}x^2+D_{xx}D_{zz}y^2+D_{xx}D_{yy}z^2\right]^{1/2}} \tag{7-16}$$

上式必须针对所论情况予以简化。大气污染就是个典型，此时对流传质远远超过污染物在同一方向的扩散：

$$D_{xx}^{(t)}\frac{\partial^2\rho_i}{\partial x^2}\ll\overline{U}\frac{\rho_i}{\partial x} \tag{7-17}$$

因此，连续性方程[式(7-12)]退化为：

$$\overline{U}\frac{\partial\rho_i}{\partial x}=D_{yy}\frac{\partial^2\rho_i}{\partial y^2}+D_{zz}\frac{\partial^2\rho_i}{\partial z^2} \tag{7-18}$$

因为感兴趣预测的污染物弥散，主要在离污染源下游长距离处，即此处

$$x^2 \gg y^2+z^2 \tag{7-19}$$

方程(7-18)的解，在式(7-19)所示情况下，可以从一般解式(7-16)中逐渐简化而得到。

首先，重排式(7-16)如下：

$$\overline{\rho_i}(x,y,z)=\frac{W\exp\left\{-\frac{\overline{U}x}{2D_{xx}}[(1-\alpha)^{1/2}-1]\right\}}{4\pi[D_{yy}^{(t)}D_{zz}^{(t)}x^2(1+\alpha)]^{1/2}} \tag{7-20}$$

式中，α 定义为：

$$\alpha=\frac{\frac{y^2}{D_{yy}^{(t)}}+\frac{z^2}{D_{zz}^{(t)}}}{\frac{x^2}{D_{xx}^{(t)}}} \tag{7-21}$$

并且由上述不等式可知 α 值非常小，于是，$(1+\alpha)^{1/2}$ 展开式仅须取前两项即可：

$$(1+\alpha)^{1/2}\approx 1+\frac{\alpha}{2} \tag{7-22}$$

这就使式(7-20)得以进一步简化并产生了最后的解：

$$\overline{\rho_i}(x,y,z)\cong\frac{W\exp\left\{-\frac{\overline{U}}{4x}\left[\left(\frac{y^2}{D_{yy}^{(t)}}+\frac{z^2}{D_{zz}^{(t)}}\right)\right]\right\}}{4\pi x[D_{yy}^{(t)}D_{zz}^{(t)}]^{1/2}} \tag{7-23}$$

到现在为止，并未考虑烟囱的高度，正是由此不断排出污染物质，也未考虑地面的影响。前者可以将坐标原点移至污染源加以考虑，即 $x=y=0$，$z=H$(烟囱高度)。结果是只须对式(7-23)稍加调整：

$$\overline{\rho_i}(x,y,z)=\frac{W\exp\left\{-\frac{\overline{U}}{4x}\left[\left(\frac{y^2}{D_{yy}{}^{(t)}}+\frac{(z-H)^2}{D_{zz}{}^{(t)}}\right)\right]\right\}}{4\pi x[D_{yy}{}^{(t)}D_{zz}{}^{(t)}]^{1/2}} \tag{7-24}$$

至于后者，地面的影响可以想象成为收容器，稍后即将

污染物质放回大气。数学模型化时可以认为重回大气的污染物来自一个假想源。此源位于与地面的对称处($z=-H$)，如图 7-2 所示。污染物想象成横过地平面。

弥散污染物质的浓度分布，其中包括边界条件的影响，可以从两源得到，即

$$\overline{\rho_i}(x,y,z)\approx\frac{W}{4\pi x(D_{yy}D_{zz})^{1/2}}\exp\left(-\frac{\overline{U}y^2}{4\pi D_{yy}}\right)\cdot \left\{\exp\left[-\frac{\overline{U}(z-H)^2}{4\pi D_{zz}}\right]+\exp\left[-\frac{\overline{U}(z+H)^2}{4\pi D_{zz}}\right]\right\} \tag{7-25}$$

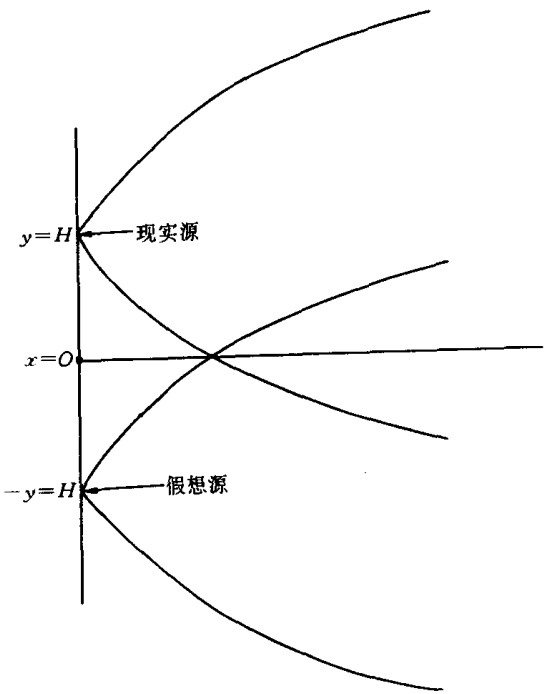


图 7-2　边界条件示意图

人们常常对地面的污染浓度感兴趣，这可以在式(7-25)中令 $z=0$ 得到：

$$\overline{\rho_i}(x,y,z)\approx\frac{W}{4\pi x(D_{yy}D_{zz})^{1/2}}\exp\left[-\frac{\overline{U}}{4x}\left(\frac{y^2}{D_{yy}}+\frac{H^2}{D_{zz}}\right)\right] \tag{7-26}$$

由式(7-25)不难看出，平均污染物质浓度随下风方向的距离而降低，即与 x^{-1} 成正比，并且与 y 和 z 方向呈指数关系。但是，此方程不能用于定量预测，除非已知扩散系数。根据大气环境下湍流特性，这些量只能由实验求取。其结果模型方程就成为半经验式。同时，必须承认，将这些观察因子结合进模型方程也对原假设(地平面之上均匀湍流，风速均匀不变等等)起个校正作用。

任何改进模型的尝试都必须考虑平均速度和扩散系数随垂直距离(高度)而变。其函数关系通常写成指数形式，在平均速度条件下，可以写成下式：

$$\overline{U}=\overline{U}_{z=H}\left(\frac{z}{H}\right)^{\beta} \tag{7-27}$$

式中，β 与烟囱高度、大气状况和地形有关。进一步改进模型可以考虑非对角线上的涡流扩散张量分量．但是，这样就造成数学上的复杂化，只能求得模型方程的数值解。

7.2.3 试井分析[1]

a) 过程描述

在石油工程中，油气井压力特性的知识对油藏特性可提供非常有用的信息。试井再结合生产数据和实验室对岩石性质的分析，对估计油和气的贮量，油藏特性的分析以及在各种操作模式下预测原油的回收有很大帮助。

在几种压力测试中，升压由于操作简单能产生更真实的

结果。关闭生产井并且在测试期内记录其底部压力。数据分析可提供油藏压力、渗透率和钻井损害的主要信息。这种试井的缺点是损失产量，在“不透气”(低渗透率)油藏情况下，导致经济上不合算。但是，只要分析瞬间数据，即在相对较短时间内收集的数据，此问题可以得到缓解。

本例的目的是开发一个方程，它可以从瞬间的压力增长数据确定重要的油藏参数。

b) 初步分析

瞬间压力分析数学模型与油藏内的径向和依时压力分布的解析表达式是等价的。如此的一个函数构成所有类型的压力试井，即升压、降压、射井等的一个理论基础。

一个模拟无限大油藏(无边界的影响)和一定产率下的单相多孔介质径向流的模型方程被开发出来。描写径向压力随时间变化的解析表达式通过解连续性方程可以得到，其中假设流体表面速度与同一点的压力梯度成正比。在这方面，必须指出，多孔岩石本质上不能确定动量方程的速度向量。更进一步说，用上述办法得到的压力分布不能提供任何点值，仅仅可以得到一个近似解，它是基于固液两相在内的局部体积平均。

井在中央并且对跨越整个岩层流开放，假设岩石是均匀的和同性的，岩石性质如孔隙和渗透率，假设不变。类似的，流体假设表现出常粘度。忽略重力，但压力梯度考虑为较小值。

c) 模型开发

流经多孔介质流体的压力分布通常用一个改进的连续性方程予以描述。它对于径向流动并且孔隙率为常数的情况可以写作：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r V_r^0)=\phi\frac{\partial p}{\partial t} \tag{7-28}$$

式中，ϕ 为孔隙率，V_r^0 为流体表面速度的径向分量，定义为流过一个固液两相的单元横断面的体积流率。

如上所述，流体表面速度假设与同一点上的压力梯度成正比，重力影响忽略不计：

$$V_r^0=-\frac{k_r}{\mu}\frac{\partial p}{\partial r} \tag{7-29}$$

式中，k_r 为有效的径向渗透率，μ 是有效粘度。

式(7 29)即为 Darcy 定律并广泛用于油藏工程。

在问题的描述中流体的压缩性必须计及，对常压缩率的流体其相应的方程假设为如下形式：

$$\rho=\rho_0\exp[c(p-p_0)] \tag{7-30}$$

式中，ρ_0 为对应于某参考压力 p_0 的密度，而 c 为压缩率。

将式(7-29)和(7-30)代入式(7-28)则可得到描述方程，改进的连续性方程为：

$$\frac{1}{r}\frac{k_r}{\mu\phi}\left[r\frac{\partial^2 p}{\partial r^2}+\frac{\partial p}{\partial r}+cr\left(\frac{\partial p}{\partial r}\right)^2\right]=c\frac{\partial p}{\partial t} \tag{7-31}$$

进一步的简化是可能的，因为人们将压力梯度考虑为较小值。于是，$(\partial p/\partial r)^2$ 项即可忽略不计。方程(7-31)因而获得类似的形式：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial p}{\partial r}\right)=\frac{c\mu\phi}{k_r}\frac{\partial p}{\partial t} \tag{7-32}$$

上式得以应用的假设虽然是受限制的，但是数学上的简化却得益颇多，原来的非线性方程变成了线性方程。再结合下列边界条件，其数学描述即可完备。

首先，油藏压力均匀一致：

$$p=p_1 \quad 在\ t=0\ 时 \tag{7-33}$$

边界上压力与上述压力相同：

$$p \to p_i \quad \text{在 } t \to \infty \text{时} \tag{7-33b}$$

进入井的流率为常量：

$$Q = \text{const} \quad \text{在 } r = r_w \text{ 时} \tag{7-33c}$$

并且可以表示为面积与表面速度的乘积：

$$Q = 2\pi r_w h \left. \frac{k_r}{\mu} \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{井} \tag{7-34}$$

上式常常写成下列形式：

$$\left. r \frac{\partial p}{\partial r} \right|_{井} = \left. \frac{Q\mu}{2\pi h k_r} \right|_{井} \tag{7-35}$$

尝试在式(7-33)到(7-35)的给定条件下解式(7-32)之前，先将数学描述变换成无因次形式。变换的步骤予以省略，此处仅给出最后的形式如下：

$$\bar{p} = \frac{p_i - p}{Q\mu} 2\pi h k_r \tag{7-35a}$$

$$\bar{t} = \frac{k_r t}{c\mu\phi r_w^2} \tag{7-35b}$$

$$\bar{r} = \frac{r}{r_w} \tag{7-35c}$$

式(7-32)～式(7-35)的无因次形式，则为：

$$\frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left[\left(\bar{r} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{r}} \right) \right] = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{t}} \tag{7-36}$$

$$\bar{p} = 0 \quad \text{在 } \bar{t} = 0 \text{ 时} \tag{7-37a}$$

$$\bar{p} = 0 \quad \text{在 } r \to \infty \text{时} \tag{7-37b}$$

$$\bar{r} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{t}} = -1 \quad \text{在 } \bar{t} = 1 \text{ 时} \tag{7-37c}$$

利用井半径远远小于油藏尺寸，上述方程及边界条件还可进一步简化。原边界条件[式(7-35)]于是可以重写为：

$$\lim_{r\to 0}\frac{\partial p}{\partial r}=\frac{Q\mu}{2\pi hk_r} \tag{7-38}$$

当描述方程组[式(7-32)、(7-33)、(7-34)和(7-38)]已变换成无因次形式时，这种理想化的重要性变得十分明显。式(7-38)所表达的假设说明还可利用相似的变换。

再一次对读者省略了细节，新的无因次独立变量为：

$$\eta=\frac{\phi\mu c}{4k_r}\frac{r^2}{t} \tag{7-39}$$

现在式(7-32)，利用式(7-35a)和(7-39)变换为：

$$\eta\frac{\mathrm{d}^2\bar{p}}{\mathrm{d}\eta^2}+(1+\eta)\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\eta}=0 \tag{7-40}$$

其边界条件变为：

$$\bar{p}=0 \quad \text{在 } \eta\to\infty\text{时} \tag{7-41a}$$

及

$$\lim_{\eta\to 0}2\eta\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\eta}=-1 \tag{7-41b}$$

必须指出，首先，式(7-40)是一个常微分方程，而式(7-32)是一个偏微分方程。其次，式(7-40)不含因变量压力，仅含压力的导数。同样，方程(7-41a)是由初始和边界条件[式(7-33a、b)]合并的结果。

在求解模型方程之前，先降低其微分的阶数，导入

$$z=\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\eta} \tag{7-42}$$

并代入式(7-40)则有：

$$\frac{\mathrm{d}z}{z}=-\frac{1+\eta}{\eta}\mathrm{d}\eta \tag{7-43}$$

积分上式，则得：

$$z=c_1\frac{\exp(-\eta)}{\eta} \tag{7-44}$$

式中，c_1 为积分常数，利用式(7-41b)则得：

$$c_1=\frac{1}{2}$$

将式(7-42)代入式(7-44)，接着积分并利用边界条件式(7-41a)，结果即得：

$$\bar{p}=-\frac{1}{2}\int_{\eta}^{\infty}\frac{\exp(-\eta)}{\eta}\mathrm{d}\eta \tag{7-45}$$

对很小的 η(<0.01)来说，式(7-45)中的指数项积分可以近似地用其级数展开式的首项代替：

$$\bar{p}\approx\frac{1}{2}\ln\left(\frac{\bar{t}}{r^2}+0.809\right) \tag{7-46}$$

主要的兴趣在于确定井压力大小(底部孔压力)。式(7-46)可以重新用原来的变量写为：

$$p\approx p_1-\frac{Q\mu B}{4\pi hk_r}\left(\ln t+\ln\frac{k_r}{\phi\mu c r_w^2}+0.809\right) \tag{7-47}$$

式中，B 为结构体积常数。

请注意，在油藏工程中压力-时间变化公式包括另外一项称为表皮因素，它是用来估算钻井损害的。

至此，方程(7-47)可用来分析升压测试。如前所述，关井之前，井正在以一定速率生产。图 7-3 画出了流率和压力随时间的变化。

如果推出式(7-47)的假设遇到升压测试情况，则压力在关井期内的变化 p_{ws}，可利用叠加原理得到。

在所论情况下，底部孔关闭的压力可以用井在常采率 Q 直到 t_s 时生产的解叠加上一个零流率之后，$t_s+\Delta t$ 的解来表达(Δt 为关闭时间，参见图 7-3)。因此，在关闭周期内任何时候的解为：

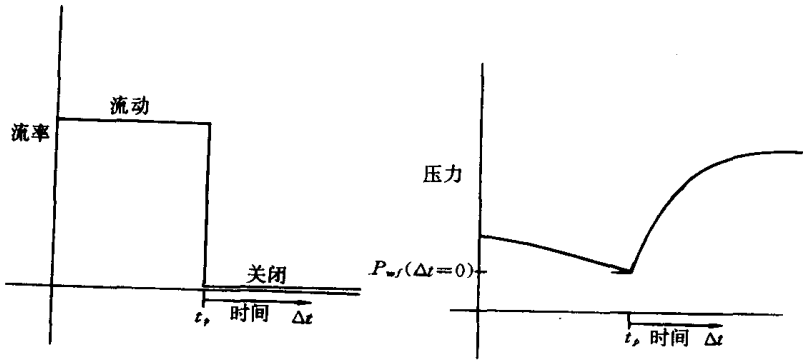


图 7-3 升压实验中理想的流率和压力变化

$$p_{ws}=p_i-\frac{Q\mu B}{4\pi hk_r}\ln\frac{t_s+\Delta t}{\Delta t} \tag{7-48}$$

平均油藏压力，于是可以从瞬时解外推到无穷关闭时间，此时在整个油藏中已经达到稳定压力区。结构层的渗透率可以从关闭期间压力上升时的速率加以确定。

式(7-48)表明，p_{ws}对 $\ln(t_s+\Delta t)/\Delta t$ 标绘必为一直线，其斜率可确定关闭以前的结构渗透率，当粘度和含油层厚度已知时。在长关闭时间，即当

$$\lim_{\Delta t\to\infty}\ln\frac{t_s+\Delta t}{\Delta t}=0 \tag{7-49}$$

从式(7-48)可得关闭压力与最初油藏压力一致，当然，这仅仅在油藏开发的最初阶段是真实的。碳氢化合物的任何损耗都使油藏的压力降低。但是，只要井在中央位置，线性外推到无穷关闭时间仍然对预测油藏平均压力有用。当然，考虑油藏构形影响必须包括在升压分析数据之中的情况除外。

7.3 热、质传递模型

7.3.1 太阳池[5]

a）过程描述

辐射热到达水面后仅一部分被水吸收，其余部分被透过或反射。最后流过水和空气界面的热量由太阳辐射热 q_s 和大气辐射热 q_a，两部分组成。太阳辐射中的长波在水面附近被吸收，而短波则透入水中，其强度随水深呈指数衰减。由长波大气辐射而形成的热流量随空气的绝对温度而不同。

与此同时，水本身有一些热量损失于大气 q_l，水蒸发热 q_v，热传导 q_c，以及水面长波辐射热 q_t。

太阳池在通常情况下，从水面到池底有一个温度梯度，使得热的利用率降低。但是，近年来，一个改进的方案已经问世。它是基于这种概念，即稳定的密度梯度可以阻止对流发生。在太阳池情况下，保持密度差可以在底层加盐（通常为 $NaCl$，$MgCl_2$）而在贮槽顶部加入纯水。

辐射热中未被反射回大气，但已透过水面的那部分热量，被溶液和悬浮粒子所吸收。因不均匀的温度分布导致垂直方向上的对流，由于系统中存在一个稳定的密度梯度而被阻止。结果达到池底温度很高而顶部水面热损降低。在池底部放置一个换热器，即可取出热量。

本分析的主要目的是用数学模型来研究太阳池的物理特性。模拟的温度分布必将反映热辐射、池尺寸、盐溶液的物性以及其他操作条件的影响。尤其是，池内依时性的温度分布必将与下列变量组成函数关系，即与池深度、辐射强度以及其在池表面上部分吸收率、热损失、空气的温度和湿度等。

b）初步分析

几个能反映太阳池的几何特性和物理面貌的简化假设引入分析如下：

将太阳池近似看作是两个无限大平行平板间的空间，因而，即可将问题考虑为一维系统。系统的底部认为是黑体。顶部平板即曝露于大气的自由面。

分析中的物理量均考虑为常数，这是因为没有任何信息说明它们随溶液密度和温度而改变。

在太阳池中假设两种方式的热传递会发生，即传导 q_c 和辐射 q_r。

c）模型开发

太阳池的依时温度分布可以通过解选定控制系统的热平衡方程而得到。如仅发生在垂直方向上的重要热传递，其描述方程可以用直接法予以开发：

$$q_c(x)+q_r(x)=q_c(x+\Delta x)+q_r(x+\Delta x)+\frac{\partial}{\partial t}[\rho c_p(T-T_R)\Delta x] \tag{7-50}$$

将 $q_c(x)$ 和 $q_r(x)$ 展开成 Taylor 级数，取前面两项，整理后得：

$$\frac{dq_c}{dx}+\frac{dq_r}{dx}+\rho c_p\frac{\partial T}{\partial t}=0 \tag{7-51}$$

注意，ρ 和 c_p 均假设与时间有关。传导热通量 q_c，可以用一维 Fourier 定律表达。

如前所述，仅仅有一部分太阳辐射热被水面所吸收 fq_s，其余则透过水面进入水中并且其分布随深度的变化为：

$$q_r=(1-f)q_s e^{-\beta x} \tag{7-52}$$

式中，f 为表面吸收的长波分率；β 为太阳辐射在水中的消耗系数。

将 q_c 和 q_r 代入式(7-51)则得描述方程中的温度分布：

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\beta q_s}{\rho c_p}(1-f)e^{-\beta x} \tag{7-53}$$

式中，α 为导温系数。

要想完成太阳池温度分布的数学描述，两个边界条件和一个初始条件必须建立起来。

顶部边界条件与空气-水表面各种形式的热通量有关，对一个在水表面无限薄的控制体来说，由大气输入的热量必与传导入水主体所传递的热量相平衡：

$$fq_s+q_a-q_c=-k\frac{\partial T}{\partial x} \tag{7-54}$$

注意，大气辐射的长波与大气温度的关系为：

$$q_a=0.97\sigma T_a^4 \tag{7-55}$$

式中，σ 为 Stefan-Boltzman 常数，T_a 为大气的绝对温度。

返回大气的热损失 q_l，如前所述，由下列三部分组成：

其中之一，辐射长波 q_t，可表达为类似式(7-55)的形式：

$$q_t=0.97\sigma T_s^4 \tag{7-56}$$

式中，T_s 为水表面的绝对温度。

由于蒸发而损失于大气的热量 q_v，可进一步分解为蒸发潜热和蒸汽的显热：

$$q_v=0.00002\rho(p_s-p_a\phi)(\Delta H_v+c_{pw}T_s) \tag{7-57}^*$$

式中，p_s 和 p_a 分别代表在水和空气表面温度下水的饱和蒸气压；ϕ 为相对湿度；ΔH_v 为水在水表面温度下的蒸发潜热：

$$\Delta H_v=595.9-0.54T_s \tag{7-58}^*$$

最后，传导损失热通量 q_c，由下式给出：

* 经验式(7-57)的单位为 cm/(min · mmHg)；式(7-58)为 cal/g 和 cal/g · C；式(7-59)为 cal/(g · min · C)。

$$q_c = 0.005382\rho(T_s - T_a) \qquad (7\text{-}59)^*$$

第二个边界条件是基于贮槽底部无热流的假设，因而两种形式的热传递在水主体中发生的总和在深度 B 处为零：

$$q_c(B) = \int_B^{\infty} \frac{dq_r}{dx} dx \qquad (7\text{-}60)$$

或者

$$-k \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=B} + (1-f)q_c e^{-\beta x} = 0 \qquad (7\text{-}61)$$

初始条件为贮槽中的初始温度均匀：

$$T = T_i \quad 在\ t = 0\ 时 \qquad (7\text{-}62)$$

关于所论问题的描述方程由式(7-53)和一组边界条件和初始条件式(7-54)、(7-61)和(7-62)组成。

至此可以指出，由于描述方程数学上的复杂性，显然是无法得出解析解，但是可有数值解如差分等。表示各种输入量对太阳池温度分布影响的关联式，可用来作整体优化。必须记住，此处所给出的模型方程中太阳池底部回收热量的影响未予考虑。

7.3.2 冷冻干燥

a）过程描述

冷冻干燥过程主要为水分从冷冻食品中升华而除去的过程，食品缩水时能使食品结构获得最小的不可逆改变，否则必将失去原来的口味。近年来，流行的超轻缩水食品得到了稳定的增长，特别与人们日益高涨的室外活动有关。

由于此类产品的价格现在仍然昂贵，应该改进过程的设计和操作以降低成本和售价。

最初的冷冻食品采用固定热量供应的连续干燥来完成。从现象上看，热从外部热源横过食品的干燥层并且随后进入

冷冻区；由水升华形成的水蒸气则逆向流动(参见图 7-4)。因此，冷冻干燥的速率与热、质传递两个过程的速率都有关系。

通常，任何过程效率的改进都与增大干燥速率有关。但是，企图增大过程的推动力必须小心从事，不能越过某些界限。比如，当超过干燥物质的临界温度时，食品将发生热损坏(通常对大多数食品为 60 C)，更有甚者，冷冻食品的温度不能超越它的熔点。因此看来改善冷冻干燥过程更加可行的途径似乎是降低热质传递的内部阻力，而对外部阻力不施加任何限制。

数学分析的目的是，作为整体研究的组成部分，认识阻力特性以及推导出确定实验中诸量的公式。模型方程使干燥速率定量地与食品的基本传递物性相联系，并构成实验研究阶段的基础。在研究的后一阶段，控制参数的影响是必须考虑的，而且要考查在各种过程条件下，比方压力、谷粒取向以及周围气体的本质等，显然这些已超出本书范围。

b) 初步分析

本研究的目的是下列两方面：

(1) 挑选出与过程阻力有关的参数；

(2) 开发出能表达对过程阻力有影响的参数表达式，其形式应适合实验研究。

如所已知，过程的效率由干燥速率来确定，而干燥速率则依赖于推动力与过程阻力之比值。增大温差的限制显然是操作人员无法控制的因素。但是干燥的阻力可部分受过程改进的影响。物料的干燥同时受传质和传热的左右，因此，所论各变量间的定量关系应建立在物质和能量守恒原理的基础之上。

在任何给定的干燥时刻，系统的特性决定于两个截然不

同的区域：一个是已经干燥的区域，而另一个区域内水仍然以冰的形式存在着。在这两个区域内没有任何物性的特殊变化，于是，可以利用宏观的描述。当然，作为划分开两个区域的水的边界随干燥的进展而移动。如此的一个时变特性清楚地说明过程是非稳态的，但作拟稳态处理不会造成任何系统误差。

c）模型开发

给定的系统对称(参见图 7-4)，被干燥物料的冷冻区，在控制体内是一致的。

已经指出，两个区(干燥和冷冻)的边界始终保持着移动状态，它提示时间因素在过程描述中的重要性。但是，平衡方程的开发却是基于对系统(并以传导方式横过干燥区)和水升华之间的热量相等的假设。作为结果，对一个本质上拟稳态的系统获得一个稳态描述。

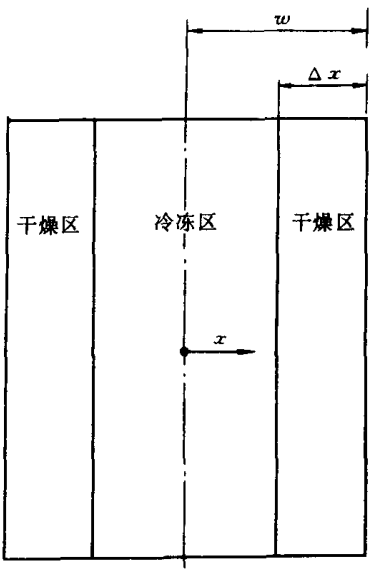


图 7-4　冷冻干燥过程示意图

热衡算

输入：温度梯度可用横过干燥区的温差和干燥区的厚度予以近似表达。假设热流的基础是单位面积，因此有：

$$q_c=\frac{k}{\Delta x}(T_s-T_f) \quad (7\text{-}63)$$

式中，Δx 是干燥区的时变长度，并且可以一个可测量，如在给定时间系统中最初水分含量的分数来表达：

$$\Delta x=(1-\alpha)w \quad (7\text{-}64)$$

式中，w 为系统的一半宽度(参见图 7-4)。

在将热源项写进公式之前，最好先消去式(7-63)中的表面温度 T_s，这是因为不经极大困难不能测量。为了这个目的，另一个独立热通量 q_i 表达式必须加入，此 q_i 可视为相界面的热能量

$$q_i=h(T_a-T_s) \tag{7-65}$$

令 $q_i=q_c$，T_s 从式(7-65)可以表示为显函数，和方程(7-64)一起代入方程(7-63)，则有：

$$q_c=\frac{k(T_a-T_f)}{\frac{h}{k}+(1-\alpha)w} \tag{7-66}$$

升华

此项表示由水到蒸汽相变所需要的热量。因为在干燥过程中水的数量随时间变化 $\alpha(t)$，所以升华热量为：

$$q_s=\frac{w}{V_w}\Delta H_s\left(-\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}\right) \tag{7-67}$$

式中，ΔH_s 为水升华的潜热。

至此，可以进行热衡算，即将输入热量与升华所需热量[式(7-66)和式(7-67)]相等，再将其重排整理成便于由实验确定与热阻有关的诸量，即得

$$1-\alpha=\frac{V_w k(T_a-T_f)}{\Delta H_s w^2\left(-\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}\right)}-\frac{k}{wh} \tag{7-68}$$

此式各项均为无因次并且方程自身的形式适合于由干燥速率数据确定传递函数。

物料衡算

类似地，表征水蒸气传递的参数和它们与可测量的量之间关系，可以由物料衡算得到。在控制体内，衡算方程代表

着热源和输出各项之间的定量关系。由于冰的相变“生”成了蒸汽，水蒸发的速率由下式表示：

$$N_w=\frac{w}{M_w V_w}\left(-\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}\right) \tag{7-69}$$

输出被表示为横过干燥区蒸汽流的速率：

$$N_w=\frac{D_w}{RT\Delta x}(p_f-p_s) \tag{7-70}$$

式中，D_w 为水的扩散系数。

实验确定表面压力是相当困难的，正如前面热衡算中从描述方程中消去表面温度一样，设法将表面压力用易于测量的量代替。利用一个蒸汽流率的独立关系，界面蒸汽传递(从物料向大气)可作如下表达：

$$N_w=\frac{k_{cw}}{RT}(p_s-p_a) \tag{7-71}$$

式中，k_{cw}为相界面物料传递系数。

表面压力 p_s，从式(7-71)中可以求出，随后代入式(7-70)，则蒸汽流的速率表达式为：

$$N_w=\frac{D_w(p_f-p_a)}{RT\left[\frac{D_w}{k_{cw}}+(1-\alpha)w\right]} \tag{7-72}$$

式(7-72)可用于确定物料阻力的重要参数。

令式(7-69)和(7-72)相等即 可得到物料衡算方程：

$$1-\alpha=\frac{M_w V_w D_w(p_f-p_a)}{RTw^2\left(-\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}\right)}-\frac{D_w}{wk_{cw}} \tag{7-73}$$

此式可用于由实验确定重要的传递系数。

本分析建立了热质传递内部阻力与湿含量、热传导以及干燥区内的蒸汽扩散程度之间的关系。由模型方程评价这些

参数是可以办到的。模型方程提供可测量的量之间一个线性关系，可测量即干燥时间和水分脱去的分数。

实验数据(参见文献[6])确认冰面后退模型的有效性。更有甚者，研究压力，谷物取向和周围气体的本性对热传导的影响结果表明，平行与肉类纤维的热传递比垂直于纤维的快，并且氦作为惰性气体比氮气要好，能达到较高的热效率。相似地，扩散程度也是氦比氮好。

7.3.3 非牛顿流体薄膜流中热质传递模型[7]

a) 过程描述

化学工程中薄膜流是很多的，在吸收塔、蒸馏塔、薄膜反应器、蒸发器以及无公害的吸收式致冷机中均可见到。而其中的物质传递传统上用湿壁塔来模拟，换句话说，湿壁塔上得到的关联式原则上可以用到填料塔的设计中去。

近年来发现，非牛顿幂律流体薄膜流中的传质和反应对于聚合物加工、发酵液、生物制药等领域，其潜在的应用也十分广泛。

气体在薄膜流中的传质，如气液两相接触时间很短，则Higbie已进行过卓有成效的研究；但如气液接触时间较长，溶质可渗透到液膜更深处，则必须考虑液膜中的速度分布，本节所讨论的数学模型正是针对这种情况。

本例主要研究非牛顿幂律流体薄膜流中物质传递与传热的规律性，寻求其浓度分布以及局部和平均 Sh 数的理论表达式，亦即数学模型，使计算机计算结果与实验数据进一步验证。

b) 初步分析

人们面对的问题是薄膜流中的传质，就是说，此问题牵涉到薄膜流动与传质或传热规律性问题。当然是动量传递与

质、热传递的耦合，但它们必须服从物质与能量守恒定律，因此可以引用本书第2章中的微观守恒方程加以解决。

要想寻求薄膜流中浓度分布必须先知道它的速度分布以及薄膜的厚度表达式，然后再注意根据所论流体的类型，选用不同的本构方程。此处，自然不能用牛顿粘性定律而必须用幂律模型[58]。

为了不使问题更加复杂化，自然人们限定所研究问题为层流运动，其中无波纹，并且假定流动为稳态，即不随时间而变。

c）模型开发

根据初步分析，薄膜流中传质(传热)过程的描述方程如下：

$$\rho \frac{\mathrm{D}u}{\mathrm{D}t} = \rho \boldsymbol{g} - \nabla \cdot (\tau + IP) \tag{7-74}$$

$$\frac{\mathrm{D}C}{\mathrm{D}t} = \mathrm{D} \nabla^2 C \tag{7-75}$$

$$(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) = 0 \tag{7-76}$$

由式(7-74)、(7-76)可得稳态液膜流动方程：

$$\rho \boldsymbol{g} = \frac{\mathrm{d}\tau_{yz}}{\mathrm{d}y}$$

积分后并引用边界条件：在气液界面 $y=0$ 处 $\tau_{yz}=0$，则得

$$\tau_{yz} = \rho g y$$

所论非牛顿流体为幂律流体，故引用二维幂律本构方程：

$$\tau_{yz} = -K \left| -\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}y} \right|^{n-1} \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}y}$$

结合在坐标原点 $y=0$ 处 $U=0$ 的条件，可导出液膜内速度分布

$$U=\left(\frac{\rho g\delta}{K}\right)^{\frac{1}{n}}\frac{\delta}{\frac{1}{n}+1}\left[1-\left(\frac{\dot{y}}{\delta}\right)^{\frac{1}{n}+1}\right] \tag{7-77}$$

或者

$$U=U_s\left[1-\left(\frac{\dot{y}}{\delta}\right)^{\frac{1}{n}+1}\right] \tag{7-77a}$$

故液膜厚度为

$$\delta=\left(\frac{K}{\rho g}\right)^{\frac{1}{2n+1}}\left(\frac{2n+1}{n}Q\right)^{\frac{n}{2n+1}} \tag{7-78}$$

液膜的平均流速

$$\overline{U}=\left(\frac{1+n}{1+2n}\right)U_s \tag{7-79}$$

以上各式中，$\dot{y}$、$\dot{z}$ 为原坐标轴；τ 为剪应力张量，n 为流动指数，K 为稠度指数，由流体性质所决定；Q 为单位宽度上的液体体积流量。

针对所论问题，薄膜流的微分质(热)量衡算式(7-75)可以改写为如下无因次方程：

$$(1-y^{\frac{1+n}{n}})\frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{\partial^2\theta}{\partial y^2} \tag{7-80}$$

式中，$\theta=\dfrac{C_S-C}{C_S-C_0}$，$y=\dfrac{\dot{y}}{\delta}$，$z=\dfrac{\dot{z}D}{U_s\delta^2}$

其定解条件为：

$$\begin{cases} y=0 & \theta=0 \\ y=1 & \dfrac{\partial\theta}{\partial y}=0 \\ z=0 & \theta=1 \end{cases} \tag{7-80a}$$

式(7-80)仍然是个描述方程，必须解此方程才能得出数学模型。

为了求解式(7-80)、(7-80a)，用分离变量法可求得其级数解：

$$\theta=\sum_{m=1}^{\infty}A_mY_m(y)e^{-\lambda_m^2z} \tag{7-81}$$

这是 Sturm-Liouville 本征值问题，本征函数 $Y_m(y)$所满足的常微分方程为：

$$\begin{cases}\dfrac{d^2Y}{dy^2}+\lambda^2\left(1-y^{\frac{1+n}{n}}\right)Y=0\\ Y(0)=0,\quad Y'(1)=0\end{cases} \tag{7-82}$$

且式(7-81)中的系数

$$A_m=\frac{\int_0^1\left(1-y^{\frac{1+n}{n}}\right)Y_m(y)dy}{\int_0^1\left(1-y^{\frac{1+n}{n}}\right)Y_m^2(y)dy} \tag{7-83}$$

式中，$0<x_1^2<x_2^2<\cdots<x_m^2<\cdots$为本征值，而 $Y_m(y)$为与 λ_m^2 对应的本征函数，$m=1,2,\cdots,\infty$。

下面，我们来确定本征值与本征函数：

设 $n=\dfrac{p}{q}$(p,q 均为正整数)，作变量置换 $y=x^p$，则式(7-82)化为：

$$\frac{d^2Y}{dx^2}-\frac{p-1}{x}\frac{dY}{dx}+\lambda^2p^2(\lambda^{2p-2}-\lambda^{3p+q-2})Y=0 \tag{7-84}$$

由此，得式(7-82)满足其第一个边界条件的解

$$Y(y)=\sum_{k=0}^{\infty}a_ky^{1+\frac{k}{p}}\quad(a_0=1) \tag{7-85}$$

显然，此处 $a_k(\lambda^2)$。为了使此函数 $Y(y)$满足其第二个边界条件，必须有：

$$\sum_{k=0}^{\infty}(1+k/p)a_k(\lambda^2)=0 \tag{7-86}$$

此即确定本征值 λ_m^2 的方程。

例如，当 $n=1/2$ 时，代入式(7-82)得：

$$Y''+\lambda^2(1-y^3)Y=0$$

令

$$Y=\sum_{i=0}^{\infty}a_i y^{i+1},\quad (a_0\neq 0)$$

则可得：

$$a_1=0,\quad a_2=-\frac{x^2}{6},\quad a_3=0,\quad a_4=\frac{x^4}{5!}$$

$$a_i=\frac{\lambda^2}{i(i+1)}(-a_{i-2}+a_{i-5}),\quad i\geqslant 5$$

当式(7-82)中 y 的幂指数$(1+n)/n$ 为分数时，例如 $n=2.5$，亦可求出其无穷级数解。

故平均局部无因次浓度(或温度)的表达式为：

$$\bar{\theta}=\frac{\int_0^1(1-y^{\frac{1+n}{n}})\theta\mathrm{d}y}{\int_0^1(1-y^{\frac{1+n}{n}})\mathrm{d}y} \tag{7-87}$$

或者改写为：

$$\bar{\theta}=\frac{1+2n}{1+n}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{A_m Y'_m(0)\mathrm{e}^{-\lambda_m^2 z}}{\lambda_m^2} \tag{7-87a}$$

根据 Sherwood 数的定义，Sherwood 数的表达式为：

$$Sh=\frac{(\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}y)_{y=1}}{\bar{\theta}} \tag{7-88}$$

局部总传质(传热)的 Sh 数为：

$$Sh=\frac{1+n}{1+2n}\frac{\sum_{m=0}^{\infty}A_m Y'_m(0)\exp(-\lambda_m^2 z)}{\sum_{m=0}^{\infty}\frac{A_m Y'_m(0)\exp(-\lambda_m^2 z)}{\lambda_m^2}} \tag{7-89}$$

根据上述定义也可求出平均 Sh 的表达式：

$$\overline{Sh}=\frac{(k_L)_m\delta}{D}=-\frac{1+n}{1+2n}\frac{1}{z}\ln\theta \tag{7-90}$$

因为 A_m，x_m，$Y'_m(0)$以及 θ 可以由数值计算分别求得，故最终完成了数学模型的开发。

由上式进一步可知，在极端情况下：

$$\overline{Sh}_{z=0}\to\infty$$

并且

$$\overline{Sh}_{z\to\infty}=\frac{1+n}{1+2n}\lambda_1^2$$

必须指出，由于流动指数 n 值，在以上讨论中，可以推广到一切正有理数，这就意味着本节的内容对牛顿流体、拟塑性流体、涨塑性流体均有效。

本模型方程已为实验数据所证实，如图 7-5 所示。

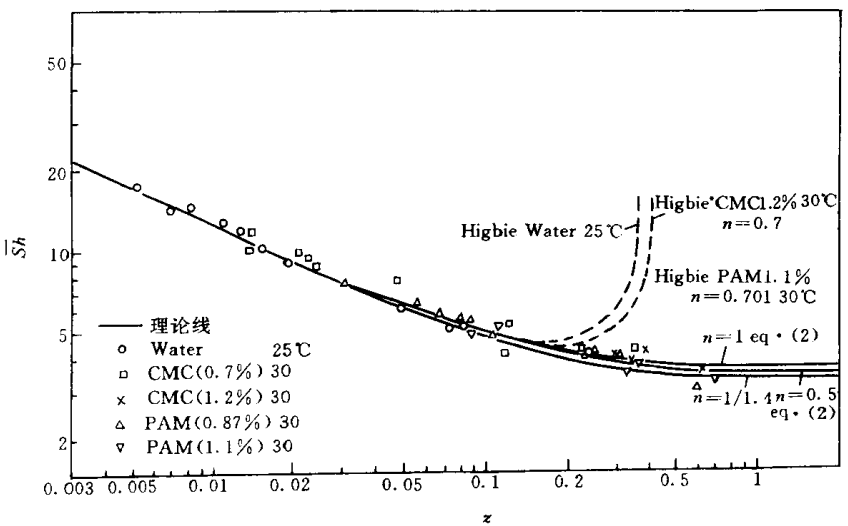


图 7-5 $\overline{Sh}$对 z 的关系

7.4 伴有化学反应的传递模型

7.4.1 甲烷-空气燃料电池[9]

a）过程描述

燃料电池是一个机电装置，其中常规燃料的化学能直接变为有用的低压直流电能。化学反应常常与矿石燃料、碳氢化合物或者其衍生物接触空气和纯氧有关。

使用燃料电池的一个主要优越性是过程效率特高，化学能直接转变为电能而不受热力学典型变换过程的约束。

在下例中考查一个甲醇空气系统组成的燃料电池(参见图 7-6)，甲醇与作为电解质的硫酸混合后送入系统，在阳极甲醇与氧离子反应生成二氧化碳和水。

电解质则提供将离子氧从空气电极输送到阳极并且在两个电极之间构成一个不透气的屏障。

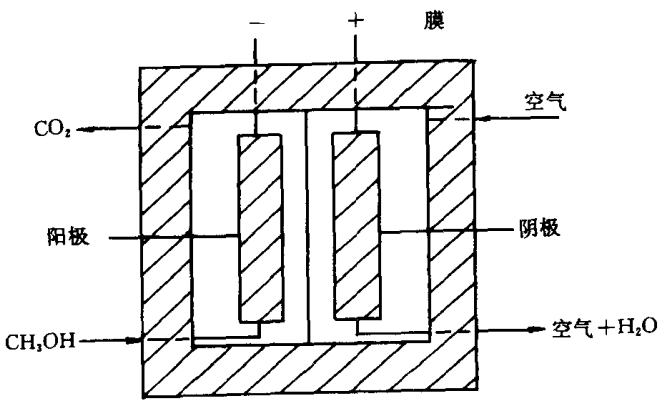


图 7-6　甲醇-空气燃料电池

在所论系统中，生成的水首先从隔膜传入电极气液表面，并且气化进入空气流。其传递机理为垂直于电极方向的分子扩散，以及流过的空气流中的对流。

化学反应是放热反应，此热量立刻被用于水分的蒸发。此外，它具有“自冷却”的特性，故无须移除热量的装置，这就显示出此特别的燃料电池的优越性。但是，必须精心操作以维护生成水的速率与排除之间的微妙平衡。任何干扰均可

导致空气电极不是淹没就是干透，其结果均使电池的效率降低。因为很多因素，如空气流率，温度区域等均影响系统。显然，只有当热-水传递速率与重要的操作变量之间有一个函数关系时，有效的电池操作才能达到。这样，系统效率于是可以与水生成和移除速率以显式相连。

一个关于所论燃料电池的数学模型可从基本原理上加以推导。由于水蒸发速率依赖于系统中的温度分布，过程可以描写为一个物质与热能同时传递的操作。

输入的信息包括：空气流率，电池入口处空气湿度，排气中二氧化碳的浓度，甲醇的燃烧热，水气化的潜能，热损失的估计，电解质和空气流中各组分的流率和热熔以及进口空气和电解质的温度。

移除水分的速率是重要的输出量;其他量如空气温度,排气和电解质流，也能确定出来。

b）初步分析

描述方程的类型依赖于出口空气流中水饱和的程度。在非常靠近常温常压条件下的饱和值时，排气中的湿度仅仅是物流温度的函数，于是，可以利用积分平衡。但是，浓度低于饱和水平时，一个热质微观平衡联立解就需要了，因为过程中舍弃的热量是直接与移除水分的量有关。

出口空气中湿含量,在开发描述方程以前必须再次解决。这可借助于开发一个在空气流和系统中的水蒸气浓度和操作变量之间的关系来达到目的。这个关系构成了决定是否达到饱和水平的基础。在这一模化阶段，假设在空气流中的水蒸气主要靠垂直于电极表面方向的扩散以及流动方向的对流(参见图 7-7)。

接下来，假设蒸发速率是水传递的控制因素，并且假设

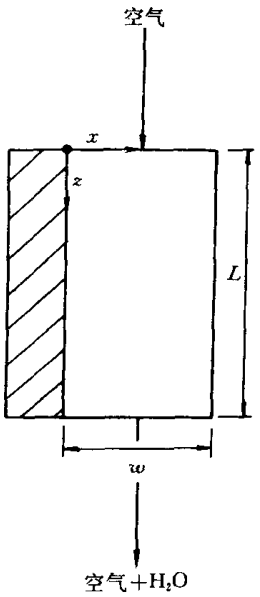


图 7-7　空气室示意图

在一个电极附近存在一个无浓度梯度的自由液面。另外的简化假设为：稳态，以及外表面的辐射及对流热损失忽略不计。

c）模型开发

针对上述条件，空气室内代表水蒸发分布的二维连续方程可写为：

$$V\frac{\partial C_W}{\partial z}=D_W\frac{\partial^2 C_W}{\partial x^2} \quad (7\text{-}91)$$

其边界条件为：

$$C_W=C_D,\ z=0,\ x \quad (7\text{-}92)$$

$$C_W=C^*,\ x=0,\ z \quad (7\text{-}93)$$

$$C_W=C_0,\ x\to\infty,\ x \quad (7\text{-}94)$$

式(7-91)～式(7-94)首先作无因次变换，即

令

$$\overline{C}=\frac{C_W-C_D}{C^*-C_0},\ \phi=\frac{x}{2}\left(\frac{V}{D_W z}\right)^{1/2} \quad (7\text{-}95)$$

其结果，偏微分式(7-91)成为变量$\overline{C}$和ϕ的常微分方程。

$$\frac{d^2\overline{C}}{d\phi^2}+2\phi\frac{d\overline{C}}{d\phi}=0 \quad (7\text{-}96)$$

其边界条件为：

$$\overline{C}=0 \quad 当\ \phi\to\infty \quad (7\text{-}97)$$

$$\overline{C}=1 \quad 当\ \phi=0 \quad (7\text{-}98)$$

经过对原方程作重大简化，其以原来变量表示的解析解可以得出如下：

$$\frac{C_w-C_D}{C^*-C_0}=\mathrm{erfc}\left\{\frac{x}{2\left|\frac{D_w z}{V}\right|^{1/2}}\right\} \tag{7-99}$$

式(7-99)对空气室内以空间坐标 x 和 z 表达的湿含量分布曲线提供了解析的描述。由于这段研究的根本目的是得到一个理论关系式，用以确定出口空气中的湿含量离开饱和程度究竟有多近。对式(7-99)取面积平均(参见本书第 4 章)设空气室的宽度 w 很小，则此室出口的湿含量为：

$$\left.\frac{\overline{C}-C_0}{C^*-C_0}\right|_{z=L}=\frac{1}{w}\int_0^W\left\{1-\mathrm{erf}\left[\frac{x}{2\left(\frac{D_w z}{V}\right)^{1/2}}\right]_{z=L}\right\}\mathrm{d}x \tag{7-100}$$

将此误差函数展成 Maclaurin 级数，接下来只取其首项，则得：

$$\left.\frac{\overline{C}-C_0}{C^*-C_0}\right|_{z=L}\approx\frac{1}{w}\int_0^W\left\{1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{xV^{1/2}}{2(D_wL)^{1/2}}\right\}\mathrm{d}x \tag{7-101}$$

故得无因次浓度表达式：

$$\left.\frac{C_w-C_0}{C^*-C_0}\right|_{z=L}\approx 1-\left(\frac{VW^2}{4\pi D_wL}\right)^{1/2} \tag{7-102}$$

式(7-102)表明空气室的出口流在下列条件下湿含量已接近饱和，即空气室的宽度 w 很小，长度 L 较大，空气速率比较低。这种要求对目前形式的燃料电池来说都能满足，因而其结论是模型方程可以用一个单元电池的宏观平衡予以建立。

以摩尔建立平衡是可取的。因为守恒原理用于物质而不是摩尔物料，所以首先需要考虑化学反应的化学计算以便建立反应物和生成物摩尔之间的关系。设以一摩尔的甲醇为基准，此电池中的化学反应可以写为：

$$CH_3OH+\frac{3}{2}O_2=CO_2+2H_2O \tag{7-103}$$

上式表明 1mol 甲醇需氧量需要 1.5×100/21mol 空气供给，与此同时，生成 1mol CO_2 和 2mol 水蒸气。

现在来求平衡方程中水项的公式，即水平衡。系统是用加入比反应化学计算还多的过剩空气操作的，于是：

$$\text{带入的水分}=\frac{100}{21}\times 1.5fY_{0,\text{air}} \tag{7-104}$$

式中，因子 f 为过剩空气与化学计量之比，并考虑成操作变量。

水分两股离开平衡系统：排出的二氧化碳和空气。因为 1mol 的 CO_2 已由化学反应生成，这一股中水离开电池的量，简写为 Y_{CO_2}。类似地，水离开空气出口的量可由空气摩尔数和空气中湿含量来确定：

$$\left[\frac{100}{21}1.5f-1.5\right]Y^{e}_{\text{空气}}$$

于是，可得水平衡方程如下：

$$\frac{100}{21}1.5fY_{0,\text{空气}}+M_{\text{W}}=\left(\frac{100}{21}1.5f-1.5\right)Y^{e}_{\text{空气}}+Y_{CO_2} \tag{7-105}$$

式中，M_{W} 为化学反应生成水的量。

如已知出口空气的湿含量 $Y^{e}_{\text{空气}}$，则由上式可求出 M_{W} 来，此量与空气温度有关，这又构成另一个变量，于是，就需要另外一个独立方程，可以从能量平衡原理加以推导。

热平衡仍然考虑在宏观水平上进行。总输入热量为物理(显)热，它来自两股输入流中：电解质和空气流。对多组分系统：

$$\text{输入}=\sum_{i=1}^{I_1} m_{i,0}c_{pi}(T_{i,0}-T_R) \tag{7-106}$$

式中 m_i 和 C_i 分别为某组分的质量和比热容。

类似地，总输出的热为某组分在排出空气和流出的电解质中的显热。此外，系统的热损失也必需计及，虽然还没有确切方法予以评价。根据以前类似系统的经验，大约有20%生成热损失殆尽。

输出项为：

$$输出=\sum_{i=1}^{I_2} m_i^e c_{pi}(T_i^e-T_R)+\Delta H_{损失} \tag{7-107}$$

所论系统同时表现出热源和散热器的特征。化学能通过放热反应转换成热能，与此同时，热能亦因水分汽化而消耗掉。作为热源项记电池效率为η，它描述甲醇转换的程度$\Delta H_r(1-\eta)$，式中ΔH_r为反应热。耗散项为水汽化吸收的总热量$m_W\Delta H_V$，式中ΔH_V为每单元质量的汽化热。

故通用的热平衡为：

$$\sum_{i=1}^{I_1} m_{i,0}c_{pi}(T_{i,0}-T_R)+\Delta H_r(1-\eta)$$
$$=\sum_{i=1}^{I_2} m_i^e c_{pi}(T_i^e-T_R)+\Delta H_{损失}+m_W\Delta H_V \tag{7-108}$$

两个平衡方程[式(7-105)和(7-108)]为一对方程，同时联解才能求出水移除速率和出口空气温度。根据这对方程的特性，用图解法似乎更加可取。

如果考虑到实验无法满足在电极附近有自由液面和电解质的浓度均匀的假设，显然，水传递的附加阻力在开发模型方程时必须考虑。

7.4.2 伴有二级不可逆反应的幂律流体薄膜流中的化学吸收[10]

a）过程描述

伴有化学反应的气体吸收是个重要的化学工业过程。除

此之外，在一些与化学工业邻近的生物医学和环境工程中也常常遇到。对牛顿流体与气体的反应吸收，前人已进行了大量卓有成效的工作，为解决工业或工程问题作出了贡献，但由于非牛顿流体与牛顿流体具有不同的流动特性，所以必须从基础进行研究。气液化学吸收是气液间质量传递与化学反应的藕合。彼此势必发生相互影响，于是使该论题具有理论意义。又由于像发酵液中溶氧和聚合物溶液中脱单，碱性溶液中吸收 CO_2 等工程上的需要，又使该论题具有实际价值。

本节示例的目的是，针对典型的幂律流体降膜流中伴有二阶不可逆反应的化学吸收，建立数学模型，寻求扩散反应方程的理论解，只有如此才能有利于小试成果的放大，迅速转化为生产力的目的。

b）初步分析

由于本节所论为非牛顿幂律流体中的化学吸收，所以描述过程的方程不能用 Navier-Stokes 微分方程。遇到应力 τ 与速度关系，必须用幂律模型和 Cauch 应力方程。

本过程为伴有化学反应的吸收，按照本书第 2 章，应该引用微分守恒方程组加以描述。

此外，假设为稳定过程，在垂直于液面方向作层流流动，只受重力作用，即在重力场；剪切力和重力相平衡，壁面无滑移，气液界面为零剪切，且无阻力。

c）模型开发

根据初步分析，非牛顿幂律流体降膜流中伴有二级不可逆反应的吸收过程，可用下列方程组予以描述：

$$\rho \frac{\mathrm{D}u}{\mathrm{D}t} = \rho g - \nabla \cdot (\tau + IP) \tag{7-109}$$

$$\frac{\mathrm{D}C}{\mathrm{D}t} = D\nabla^2 C + r \tag{7-110}$$

$$(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) = 0 \tag{7-111}$$

$$r = k_2 C_A C_B \tag{7-112}$$

再根据初步分析中的假设，则充分发展后的液膜中速度分布和平均液膜厚度，像本章 7.3.3 中所见，由方程式(7-109)和(7-111)导出：

液膜厚度为：$$\delta = \left(\frac{K}{\rho g}\right)^{1/(2n+1)} \left(\frac{2n+1}{n} Q\right)^{n/(2n+1)} \tag{7-113}$$

液膜速度分布：$$u_z = u_s \left[1 - \left(1 - \frac{\dot{y}}{\delta}\right)^{\frac{n+1}{n}}\right] \tag{7-114}$$

液膜表面速度：$$u_s = \left(\frac{\rho g}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1}\right) \delta^{\frac{n+1}{n}} \tag{7-115}$$

液膜平均速度：

$$u_m = \left(\frac{n}{2n+1}\right) u_s \tag{7-116}$$

稳定条件下，气相阻力忽略不计，扩散反应方程由式(7-110)，(7-112)可得：

$$D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial \dot{y}^2} = u_z \frac{\partial C_A}{\partial \dot{z}} + k_2 C_A C_B \tag{7-117}$$

$$D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial \dot{y}^2} = u_z \frac{\partial C_B}{\partial \dot{z}} + k_2 C_A C_B \left(\frac{b}{a}\right) \tag{7-118}$$

其边界条件：

$$\begin{cases} \dot{y} = \delta, \ C_A = C_{AS}, \ \dfrac{\partial C_B}{\partial \dot{y}} = 0 \quad \text{(气液界面)} \\ \dot{y} = 0 \qquad \dfrac{\partial C_A}{\partial \dot{y}} = 0 \quad \text{(壁面处)} \\ \dot{z} = 0, \ C_A = 0, \ C_B = C_{B0} \quad \text{(进入端)} \end{cases} \tag{7-119}$$

设界面浓度为 C_{BS}，b 组分在降膜中是变化的，由 C_{BS} 到 C_B 连续变化。如果组分浓度在 A 组分扩散区域内与 $\dot{y}$ 无关，则 B 组分的浓度保持恒定，即为 C_{BS}，则方程(7-117)可写为：

$$D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} = u_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + (k_2 C_{BS}) C_A \qquad (7\text{-}120)$$

以无因次形式表示之，则可写为：

$$\left[1-(1-y)^{\frac{n+1}{n}}\right]\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} - k^* \theta \qquad (7\text{-}121)$$

边界条件：

$$z=0,\ \theta=0 \qquad (7\text{-}121a)$$

$$y=0,\ \frac{\partial \theta}{\partial y}=0 \qquad (7\text{-}121b)$$

$$y=1,\ \theta=0 \qquad (7\text{-}121c)$$

式中，无因次变量定义为：

$$\theta=\frac{C_A}{C_{AS}},\ z=\frac{\dot{z}D_A}{\delta^2 V_s},\ y=\frac{\dot{y}}{\delta},\ k^*=\frac{k\delta^2 C_{BS}}{D_A}$$

求解式(7-121)时，令

$$\theta(x,y)=\bar{v}(y)+\bar{u}(z,y)$$

则式(7-121)及其边界条件，通过线性叠加能够分解成为两个特征方程组，即

特征方程之一：$\left[1-(1-y)^{\frac{n+1}{n}}\right]\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial y^2} - k^* \bar{u}$

(7-122)

边界条件：

$$\begin{cases} z=0 & \bar{u}=-\bar{v} \\ y=0 & \dfrac{\partial \bar{u}}{\partial y}=0 \\ y=1 & \bar{u}=0 \end{cases}$$

特征方程之二：$$\frac{d^2 \bar{v}}{dy^2} = K^* \bar{v} \qquad (7\text{-}123)$$

边界条件：

$$\begin{cases} y=0 & \dfrac{\mathrm{d}\bar{v}}{\mathrm{d}y}=0 \\ y=1 & \bar{v}=1 \end{cases}$$

由本章 7.3.3 节中可知，式(7-122)可变换为 Sturm-Liouville 方程的形式，然后可求得理论解，即：

$$\bar{u}=\sum_{j=1}^{\infty}\bar{A}_j\,\bar{y}_j(z)\mathrm{e}^{-\lambda_j^2 z} \tag{7-124}$$

其中的系数$\bar{A}_j$，特征值 λ_j 以及特征函数$\bar{y}_j(z)$均可由文献[7]查到。

特征方程之二[式(7-123)] 的解为：

$$\bar{v}=\frac{\exp(-K^{*1/2}y)+\exp(K^{*1/2}y)}{\exp(-K^{*1/2})+\exp(K^{*1/2})} \tag{7-125}$$

于是，伴有二级不可逆反应的无因次吸收总量便可写为：

$$W_p^{+}=\frac{N_A}{qC_{AS}}=\frac{2n+1}{n+1}\left[\sum_{j=1}^{\infty}\frac{\bar{A}_j\,\bar{y}'(1)}{\lambda_j^2}(1-\mathrm{e}^{-\lambda_j^2 z})+\frac{\exp(K^{*1/2})-\exp(-K^{*1/2})}{\exp(K^{*1/2})+\exp(-K^{*1/2})}K^{*1/2}z\right] \tag{7-126}$$

文献[10]中曾指出，液膜相当厚或快反应时，第一部分即式(7-124)衰减为零。浓度分布为上式中的第二部分决定。易和黄[11]文曾指出，当 $K^{*}<10$，即慢反应或液膜很薄或大分子扩散时，流体力学条件对吸收才有影响。所以，我们可认为当 $K^{*}>10$ 时，$\theta=\bar{v}$，故伴有二级不可逆反应无因次吸收总量为：

$$W_p^{+}=\frac{2n+1}{n+1}\left[\frac{\exp(K^{*1/2})-\exp(-K^{*1/2})}{\exp(K^{*1/2})+\exp(-K^{*1/2})}K^{*1/2}z\right] \tag{7-127}$$

式(7-126)和(7-127)为非牛顿降膜流中伴有二级不可逆反应，而 B 组分浓度在 A 组分扩散区内保持不变时的无因次

吸收总量理论方程，亦即所要求的数学模型方程。

符 号 说 明

A 系数[-]

B 结构体积常数[-]，深度[m]

a,b 化学计量数[-]

C 压缩率[-]

C 摩尔浓度[mol/m^3]

c 比热容[$J/(kg \cdot K)$]

D 直径[m]

D 扩散系数[m^2/s]

f 摩擦系数，分率[-]

g 重力加速度[m/s^2]

H 高度[m]

H 蒸发潜热[J/kg]

H 热容[$J/(kg \cdot K)$]

h 高度[m]

h 放热系数[$J/(s \cdot m^2 \cdot K)$]

I 单位张量[-]

K 稠度系数[$N \cdot s^n/m^2$]

k 反应速率常数[$m^3/(mol \cdot s)$]

k 导热系数[$J/(s \cdot m \cdot K)$]

k 传递系数[m/s]

L 长度[m]

M 分子量[kg/mol]

m 质量[kg]

N 传递速率[$mol/(m^2 s)$]

n 流体特性指数[-]

p 压力[Pa]

p 概率密度函数

Q,q 流量[m^3/s]

q 热量[J/s]

R 半径[m]

R 气体常数[$J/(mol \cdot K)$]

r 反应速率[$mol/(m^2 \cdot s)$]

T 温度[K]

t 时间[s]

U,u 流速[m/s]

V 流速[m/s]，体积[m^3]

w 宽度[m]，质点的质量[kg]

W 无因次吸收总量[-]

x 湿含量[mol/mol]

x 坐标轴[m]

y 坐标轴[m]

Y 摩尔湿度[-]

z 坐标轴[m]

希腊字母

α 水分分率[-]

β 消耗系数[-]

δ 液膜厚度[m]

ξ 比例系数[-]

η 效率，无因次变量[-]

λ 本征值[-]

μ 粘度[Pa·s]

ρ 密度[kg/m^3]

ρ 组分浓度[mol/m^3]

σ 平均弥散[m]

ϕ 孔隙率，相对湿度[-]

上标

t 湍流

e 平衡的

$*$ 饱和的

下标

1 处的

2 处的，二阶的

c 外表面的

i 组分的

l 液相的

m 平均的

p 定压的

r 反应的

s 表面的

t 阀值的

w 壁面的，水的

参 考 文 献

[1] Govier G W, Aziz K. The Flow of Complex Mixtures in Pipes. New York: Van Nostrand Reinkold Company, 1972

[2] Monin A S, Yaglon A M. Statistical Fluid Mechanics. Cambridge, The MIT Press, 1971

[3] Csanady G T. Turbulent Diffusion in the Enviroment. New York: D Reidel Publishing Co, 1972

[4] Matthews C S, Russell D G. Pressure Builtup and Flow Tests in Wells. SPE of AIME, 1967

[5] Chepurniy N S, Savage B, Lawand T A. Technical Report T. BI. Montreal: Brace Research Institute, McGill University, 1972

[6] Sandall O C, King C J, Wilke C R. Am Inst Chem Eng J. 1967, 13: 428～438

[7] 江体乾，黄德成，徐英农．非牛顿流体薄膜流中传质和传热的理论研究．化工学报，1982，33(2)：117～128

[8] 江体乾著．工业流变学．北京：化学工业出版社，1995

[9] Okrent E H，Tammy B L. Chem Eng Symp Seriers——74. 1967

[10] 褚家瑛，江体乾．伴有二级不可逆反应的非牛顿流体薄膜流中化学吸收的研究．化工学报，1985. 36(2)：179～188

[11] Yin S M，Huang P G. Chem Eng Sci. 1981，36：387～344

[12] Stanislav J F. Mathematical Modeling of Transport Phenomena Processes，Ann Arber Science，USA，1982

[13] 江体乾，褚家瑛，徐英农．非牛顿流体薄膜流中质量传递的实验研究．化工学报，1982，35(4)

第 8 章　生物、医学工程中的模型

8.1　前　　言

上一章列举了传递过程的模型，从现在起，将分别再介绍几个在某一领域结合实际的数学模型，从中读者可以体会到数学模型的实际应用。与化学工程最靠近的领域之一为生物工程和生物医学工程，本章即以此为对象，介绍几个已经建立的数学模型，借以启发思维，起借鉴作用。

与此同时，化学工程发展的总趋势为与其他学科交叉，从而派生出新成果。生物工程和生物医学工程是化学工程发展方向之一，也是近年来研究的一个热点所在。故介绍几位化学工程人员的研究成果，也有倡导更多的化学工程人员转向该领域以及该领域的工程技术人员更多地与化学工程相结合之意。

8.2　血液流动的数学模型[1]

a）过程描述

从正常人体生理学的观点看问题，血液流动是维持生命的最根本条件。

众所周知，人体血液系由血细胞和血浆两部分组成。血细胞包括有红细胞、白细胞和血小板等，而血浆包含有水分、无机盐和蛋白质等。血细胞分散悬浮于血浆中形成一种悬浮液，是有活性的塑性流体，因为血液也有一个屈服应力，其流变模型为 Casson 方程而不是 Binghamn 方程[2]。

人体体内循环系统是由血液经血管流动而完成的，由于人体内的血管分升压/降压、主动脉、粗动脉、大静脉和毛细血管，其直径不同，血液流速也不同，从 0.05～63.0cm/s 不等。这中间也存在压力下降。人们可以根据血流压降数据进行临床监护或作出诊断。本节的目的就是为此类临床监护或诊断提供一个基础，即数学模型。

b）初步分析

一般认为，血浆是牛顿型流体，而全血则因为是一种活性悬浮液，是非牛顿流体。其本构关系不同，模型开发时首先要注意根据其本质选取流变模型。但是，不管什么类型的流体总得在血管中流动，一流动就会产生压降，自然用得着流体力学的通用概念。但必须注意，血管壁既可渗透又具有弹性，是一种特殊化的柔性管道。为了简化问题，在模型开发之初假设血管为一无弹性通道，且壁渗透已达到平衡，然后设法弥补。又假设血液流动为稳态，无脉动。

c）模型开发

由上分析知血液服从 Casson 方程：

$$\tau^{\frac{1}{2}}=\tau_y^{\frac{1}{2}}+S\gamma^{\frac{1}{2}} \tag{8-1}$$

式中，屈服应力

$$\tau_y^{\frac{1}{2}}=(H-0.10)(C_F+0.5) \tag{8-2}$$

式中 C_F——每 100ml 血液中所含纤维蛋白的个数；

H——以分率表示的红细胞压积。

式(8-2)的应用条件为 $0.21<C_F<0.46$，以及 $H>0.10$(低于此限，即不出现屈服应力)

而

$$S=\left[\frac{\mu_p}{(1-H)^{\alpha-1}}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{8-3}$$

式中，μ_p 为血浆粘度；α 为与蛋白质成分有关的一个参数，通

常其值为 $\alpha=3.271$；S 的平方具有粘度的因次，称为 Casson 粘度，记为 μ_c。

考察式(8-1)则可看出：

$$f(\tau)=\dot{\gamma}=\left(\tau^{\frac{1}{2}}-\tau_y^{\frac{1}{2}}\right)^2/\mu_c$$

是一个连续函数，即当 $\tau>\tau_y$ 时，

$$f(\tau)=\dot{\gamma}=\left(\tau-2(\tau\tau_y^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}}+\tau_y\right)/\mu_c \tag{8-4}$$

而当 $\tau\leqslant\tau_y$ 时，$f(\tau)=0$；按照流体力学处理方法，可得具有屈服应力流体在圆管内作稳态流动时的流量公式：

$$\frac{Q}{\pi R^3}=\frac{1}{\tau_w^3}\int_{\tau_y}^{\tau_w}\tau^2 f(\tau)\mathrm{d}\tau \quad (\tau>\tau_y) \tag{8-5}$$

如将式(8-4)代入式(8-5)，积分后可得：

$$\frac{Q}{\pi R^3}=\frac{\tau_w}{\mu_c}\left[\frac{1}{4}-\frac{4}{7}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{3}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)-\frac{1}{84}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)^4\right] \tag{8-6a}$$

亦即

$$\frac{4Q}{\pi R^3}=\frac{\tau_w}{\mu_c}\left[1-\frac{16}{7}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)^{1/2}+\frac{4}{3}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)-\frac{1}{21}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)^4\right] \tag{8-6b}$$

或者写为：

$$\frac{8u_m}{D}=\frac{\tau_w}{\mu_c}\left[1-\frac{16}{7}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)^{1/2}+\frac{4}{3}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)-\frac{1}{21}\left(\frac{\tau_y}{\tau_w}\right)^4\right] \tag{8-6c}$$

因为管壁剪应力：

$$\tau_w=\frac{D\Delta p}{4L} \tag{8-7}$$

故合并式(8-6c)和式(8-7)，可得一等价的，更为直接有用的形式：

$$\frac{8u_m}{D}=\frac{1}{\mu_c}\left[\frac{D\Delta p}{4L}-\frac{16}{7}\left(\frac{D\Delta p}{4L}\right)^{1/2}\tau_y^{1/2}+\frac{4}{3}\tau_y-\frac{1}{21}\left(\frac{\tau_y^4}{\left(\frac{D\Delta p}{4L}\right)^3}\right)\right] \tag{8-8}$$

式(8-8)中压力梯度 $\Delta p/L$ 与管径 D，平均流速 u_m 以及粘度 μ_c 和 τ_y 都联系了起来，照理说，这就是所求的模型方程了。但是，从该式求 $\Delta p/L$ 并非易事，因此，必须设法将式(8-8)改成其他形式，使之能直接求出 $\Delta p/L$。

方法之一为对式(8-8)无因次化，并将传统的 Fanning 摩擦系数概念应用于血液流动，即用修正的雷诺数 Re_b 和反映血液流变特性的屈服准数 Y_b 来表示摩擦系数，即

$$\phi(Re_b, Y_b, f)=0$$

式中，$f=D\Delta p/(2u_m^2 L_\rho)$，

$Re_b=Du_m\rho/\mu_C$，

$Y_b=D\tau_y/(u_m\mu_C)$

为此，在式(8-8)两边乘以 $\mu_C/(8u_m^2\rho)$，并将上述无因次准数代入，则可得：

$$\frac{1}{Re_b}=\frac{f}{16}-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{7}\left(\frac{Y_b f}{Re_b}\right)^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{6}\frac{Y_b}{Re_b}-\frac{1}{21}\frac{Y_b^4}{f^3 Re_b^4} \qquad (8\text{-}9)$$

上式两边均除以 f，则得：

$$\frac{1}{fRe_b}=\frac{1}{16}-\frac{2^{\frac{1}{2}}}{7}\left(\frac{Y_b}{fRe_b}\right)^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{6}\frac{Y_b}{fRe_b}-\frac{1}{21}\frac{Y_b^4}{f^4 Re_b^4} \qquad (8\text{-}10)$$

细查上式很容易看出，乘积 fRe_b 是 Y_b 的唯一的函数，因此可以算出不同 Y_b 值时的 f 和 Re_b，当 $Y_b=0$ 时，$f=\frac{16}{Re_b}$ 同 Poiseuille 定律的形式一致，如图 8-1 所示。这就是所要求的无因次模型方程。

最后必须指出，模型开发时假设通过血管壁的渗透已达平衡，并且未考虑弹性壁的影响等因素。但是，根据现代流体力学的知识，弹性壁能起减阻作用，这些因素可能因相互消长而影响不大。

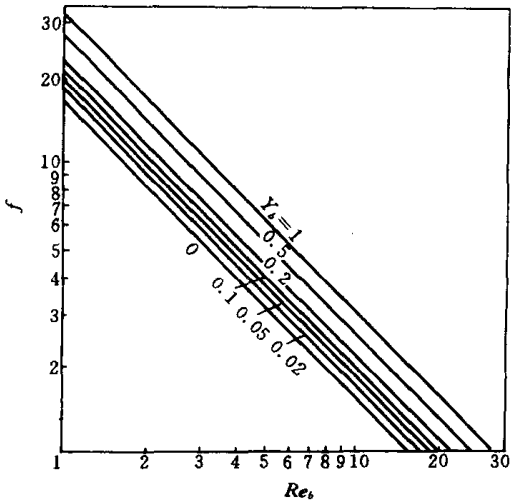


图 8-1　Y_b 一定时，f 与 Re_b 之间关系

还须指出，该模型方程仅能适用于人体增压主动脉外血管内的流动，但微血管（毛细血管、小动脉和小静脉）的量级几乎与红细胞直径的量级相同，细胞系变形通过，并非流动，故亦不适用。

不管怎样，此模型总是可以为基于血液压降的临床监护和诊断仪器的设计提供参考，结合临床作进一步的改进之用。

8.3　血液氧合反应器模型[3]

a）过程描述

血液氧合器是心脏外科必要的手术工具——人工心肺机的关键部分，以前医院中使用的多为直接接触式氧合器，从化学工程的观点即是一个效率最低的吸收器。由于此类氧合器具有机械转动部件，容易损伤细胞，以至于运转时间很短，否则血细胞的损害达到不可接受的程度。同样，无法抢救人的生命。

近年来发展起来的膜式氧合器，则无转动部件，具有损伤

血细胞小的独特优点，可以延长使用时间 1～2 倍，从而可以延长手术时间，大大有利于抢救更多的生命，社会效益显著。

如果换成化学工程的术语说话，氧合器就是一个反应吸收器，其中进行着氧气的吸收或/和二氧化碳的解吸排除过程。亦即一个反应传质过程。交换的气体是通过膜进行的，也是一个固膜传质过程。

b）初步分析

经分析可知，此过程为伴有氧与血红蛋白发生化学反应的对流传质过程。为了使问题容易解决，并希望与真实情况尽量接近，特作如下几点假设：

1）血液为连续介质并符合 Casson 模型，流体在与氧开始接触以前，已达到充分发展并保持稳态层流，流道的宽度和缝隙厚度相比为无穷大；流体在固壁面上无滑移；

2）血红蛋白的氧合为瞬态可逆反应；因此，在任何局部区域氧与氧合血红蛋白保持反应平衡；

3）血液中氧合血红蛋白的扩散速率与氧相比可以忽略不计，轴向氧的扩散亦忽略；

4）氧在血液中的物理溶解符合 Henrry 定律，且在氧-膜界面达到平衡；

5）本讨论的对象为平板膜氧合器，即二平行平板间的流动，是一个典型的基本流动。

c）模型开发

氧合器中氧的传递过程可归结为氧与血红蛋白(H_b)间发生的化学反应，生成氧合血红蛋白(H_bO_2)的吸收过程。即

$$H_b + O_2 \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} H_bO_2$$

其反应速率为：$r_{H_bO_2} = k_1 C_{H_b} C_{O_2} - k_2 C_{H_bO_2}$

由于反应速率常数 k_1 和 k_2 的数量级为 $10^4\sim10^6$ 左右，因而，上述反应可视为瞬间可逆反应。

伴有化学反应的对流传质方程可以写为：

$$\frac{dC_i}{dt}=-D_{O_2}\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}+r_i \tag{8-11}$$

式中，$\frac{d}{dt}$为随体导数$\left(\frac{\partial}{\partial t}+u_j\frac{\partial}{\partial x_j}\right)$，下标 i 代表 H_b，O_2 或 H_bO_2。要想解传质方程[式(8-11)] 必须先解决流体速度分布问题。根据初步分析中的假定(1)以及 Casson 模型，可推导得二平行平板间血液流动的速度分布为：

$$u_x=\begin{cases}\dfrac{3}{2}u_{av}\dfrac{1-\left(\frac{y}{b}\right)^2-\frac{8}{3}\left[1-\left(\frac{y}{b}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\left(\frac{y_c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}+2\left(1-\frac{y}{b}\right)\frac{y_c}{b}}{1-\frac{12}{5}\left(\frac{y_c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}+\frac{3}{2}\left(\frac{y_c}{b}\right)-\frac{1}{10}\left(\frac{y_c}{b}\right)^3} & \text{当 } y>y_c \\ \dfrac{3}{2}u_{av}\dfrac{1-\frac{8}{3}\left(\frac{y_c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}+2\left(\frac{y_c}{b}\right)-\frac{1}{3}\left(\frac{y_c}{b}\right)^2}{1-\frac{12}{5}\left(\frac{y_c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}+\frac{3}{2}\left(\frac{y_c}{b}\right)-\frac{1}{10}\left(\frac{y_c}{b}\right)^3} & \text{当 } y<y_c\end{cases} \tag{8-12}$$

式中，y_c 为 $\tau=\tau_y$ 时的值，并有 $y_c/b=\tau_y/\tau_w$。如令 $\eta=y/b$，$u_r=u_x/u_{av}$，$\eta_c=y_c/b$，则式(8-12)变为：

$$u_r=\begin{cases}\dfrac{3}{2}\dfrac{1-\eta^2-\frac{8}{3}\left[1-\eta^{\frac{3}{2}}\right]\eta_c^{\frac{1}{2}}+2(1-\eta)\eta_c}{1-\frac{12}{5}\eta_c^{\frac{1}{2}}+\frac{3}{2}\eta_c-\frac{1}{10}\eta_c^3} & \text{当 } \eta>\eta_c \text{ 时} \\ \dfrac{3}{2}\dfrac{1-\frac{8}{3}\eta_c^{\frac{1}{2}}+2\eta_c-\frac{1}{3}\eta_c^2}{1-\frac{12}{5}\eta_c^{\frac{1}{2}}+\frac{3}{2}\eta_c-\frac{1}{10}\eta_c^3} & \text{当 } \eta\leqslant\eta_c \text{ 时}\end{cases} \tag{8-13}$$

当 $\tau_y=0$ 时，因 $\eta_c=0$，上式简化为 $u_r=3(1-\eta^2)/2$，此即牛顿流体的速度分布。随着流体流速的增加，η_c 逐渐减少。换言之，τ_y 与 τ_w 之比越来越小，当 η_c 小到一定程度时，即可视作牛顿流体。由流量与压差关系可推得 η_c 与 u_{av} 受下式约束：

$$1+\frac{2}{3}\eta_c^{-1}-\frac{8}{5}\eta_c^{-1/2}-\frac{1}{15}\eta_c^{2}-\frac{2u_{av}\mu_c}{b\tau_y}=0 \qquad (8\text{-}14)$$

根据描述方程[式(8-11)]以及初步分析的假定(2)～(4)，可将平板膜式氧合器中氧的传递问题归结为以下数学物理问题：

$$u_x(y)\left[1+f(p_2)\frac{\partial p_2}{\partial x}\right]=D_{O_2}\frac{\partial^2 p_2}{\partial y^2} \qquad (8\text{-}15)$$

式中，$f(p_2)=\mathrm{d}C_{H_bO_2}/\mathrm{d}C_{O_2}=\beta \mathrm{d}s/\mathrm{d}p_2$ 即氧解离曲线的导函数，下标 1、2 表示氧合器的进、出口；β 为血液氧容量与物理溶解度之比；S 为氧在血液中的饱和度(%)。由此可知，当 $f=0$ 时，即为物理吸收的情况。

式(8-15)的边界条件：

$y=b$，$x>0$，$p_2=p_m$

$x\leqslant 0$，任意 y，$p_2=p_1$

$y=0$，任意 y，$\dfrac{\partial p_2}{\partial y}=0$

引入无因次变量，即令：

$$\theta=\frac{p_2-p_1}{p_m-p_1},\ \eta=y/b,\ \zeta=D_{O_2}x/u_{av}b^2$$

代入上式，则得如下非线性偏微分方程：

$$u_r(\eta)[1+f(\theta)]\ \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}=\frac{\partial^2\theta}{\partial\eta^2} \qquad (8\text{-}16)$$

及其定解条件：

$\eta=1$，$\zeta>0$，$\theta=1$

$\zeta\leqslant 0$，任意 η，$\theta=0$

$\eta=0$，任意 ζ，$\dfrac{\partial\theta}{\partial\eta}=0$

于是，氧解离曲线的导函数化为：

$$f(\theta)=\beta\frac{\mathrm{d}s(\theta)}{\mathrm{d}p_c}\frac{\mathrm{d}p_c}{\mathrm{d}p_2} \tag{8-17}$$

局部 Sherwood 数由下式求得：

$$Sh(\zeta)=\frac{1}{1-\theta'}\frac{\partial\theta}{\partial\eta}\bigg|_{\eta=1} \tag{8-18}$$

其中 $\theta'=\int_0^1\theta u_r(\eta)\mathrm{d}\eta$

平均 Sherwood 数为：

$$\overline{Sh(\zeta)}=\frac{1}{\zeta}\int_0^\zeta Sh(\zeta)\mathrm{d}\zeta=\frac{1}{\zeta}\int_0^\zeta\frac{1}{1-\int_0^1\theta u_r(\eta)\mathrm{d}\eta}\frac{\partial\theta}{\partial\eta}\bigg|_{\eta=1} \tag{8-19}$$

由上式可以看出，式(8-16)由于 $f(\theta)$ 是 θ 的复杂函数，故上述边值问题难以获得解析解，只能借助于数值方法求取数值解。当各结点上的 θ 值求出以后，可进而求取浓度以及局部或平均 Sherwood 数。

图 8-2 所示为全血化学吸收的实验数据和由式(8-19)算

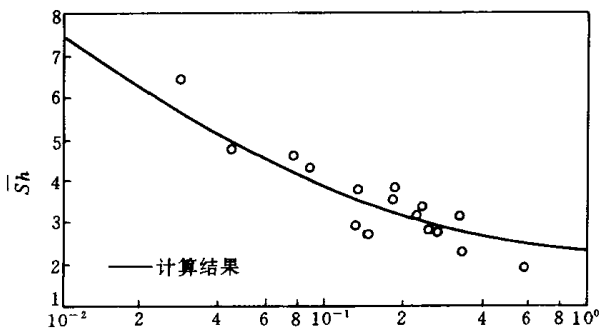


图 8-2　全血化学吸收关系图

得的理论值的比较，由图看出，结果是令人满意的，因而证明本法开发的数学模型是正确无误的。

8.4 血液低密度脂蛋白净化过程中过量净化剂分离——间歇吸附模型[5]

a）过程描述

体外循环低密度脂蛋白净化技术是近 20 年来新兴的新型医疗方法，对防治高脂蛋白血症及动脉粥样硬化具有重要意义。

血液中的低密度脂蛋白(LDL)内含有胆固醇、甘油三酸脂，其含量过高不利于健康，一向为中老年人的大忌。而血液中的纤维蛋白元的含量过高，又是高粘血滞症的主要致病因素。而新型医疗方法，即低密度脂蛋白诱导沉淀技术，可以一次同时除去上述三种物质在血液中的含量，并可以定量控制。据文献报道，该法在全世界范围至今仅进行了 600 多例临床，效果明显。我国仅上海华山医院做了五十余例中风病人的治疗，收到了立竿见影的效果，预计该医疗方法将在 5～10 年内在我国各地推广应用。

所谓血液低密度脂蛋白诱导沉淀技术包括下列几个步骤：

1）在血液分离器中分离出血浆；

2）加入诱导沉淀剂，使血浆中的胆固醇、甘油三脂等或 LDL 和 VLDL 以及纤维蛋白元沉淀下来；

3）滤去沉淀物；

4）脱除掉过量的诱导沉淀剂；

5）调整好 pH 值和渗透压，将处理好的血浆与血细胞一起输回人体。

临床实践表明：从病人动脉取血经此净化设备处理，完成上述5个循环步骤后再将净化后的血液经静脉送回人体。如此，经2.5～3小时可以净化2500～3000毫升血液，病人可以看书看报，坐卧皆可，无任何痛苦，不需吃任何药物，效果明显，优于任何药物治疗。据称此法对老年痴呆亦有疗效。

本书介绍的为上述5个步骤中第4项，过量血液净化剂吸附分离过程的数学模型。

b）初步分析

本分析仅考虑间歇式吸附，即不考虑流动状态的影响，仅考虑传质及反应，并假定吸附为等温过程。

假定吸附质在吸附过程中的机理由下述几个步骤组成：

1）吸附质从液相主体向吸附剂颗粒外表面的传递；

2）吸附质在颗粒孔隙流体中的扩散传递；

3）颗粒孔隙中的吸附质分子与吸附剂活性中心之间的相互作用。

对单组分系统，根据上述传递步骤即可建立起代表间歇吸附动态行为的数学模型。

c）模型开发

根据上述初步分析，采用直接法建立数学模型如下：

（1）吸附质在液相主体中的微分物料衡算方程：

$$\frac{dC}{dt}=\left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right)\frac{3}{R_0}K_f[C_p(t,R_0)-C] \tag{8-20}$$

初始条件：　　$C=C_0$，$t=0$　　(8-21)

（2）吸附质在颗粒相中传质时的微分物料衡算方程：

$$\varepsilon_p\frac{\partial C_p}{\partial t}+\frac{\partial C_s}{\partial t}=\frac{\varepsilon_p\cdot D_p}{r^2}\left(2r\frac{\partial C_p}{\partial r}+r^2\frac{\partial^2 C_p}{\partial r^2}\right) \tag{8-22}$$

边界条件：

$$C_p=0,\ t=0,\ 0\leqslant r\leqslant R_0 \tag{8-23}$$

$$C_S=0,\ t=0,\ 0\leqslant r\leqslant R_0 \tag{8-24}$$

$$\left.\frac{\partial C_p}{\partial r}\right|_{r=0}=0,\ t>0 \tag{8-25}$$

$$\varepsilon_p D_p\left.\frac{\partial C_p}{\partial r}\right|_{r=R_0}=K_f[C-C_p(t,R_0)],\ t>0 \tag{8-26}$$

上式中 C——吸附质在液相主体中的浓度，g/dL；

C_p——吸附质在吸附剂颗粒孔隙液体中的浓度，g/dL；

C_S——吸附质在吸附相中的浓度，g/g 湿树脂；

r——吸附剂颗粒半径，cm；

ε_p——吸附剂颗粒孔隙率；

D_p——吸附质在吸附剂颗粒孔隙中的扩散系数，cm^2/s；

t——时间，s；

K_f——吸附剂颗粒外表面的膜传质系数，cm/s。

(3) 吸附质与吸附剂活性中心相互作用速率方程：

由于蛋白质的分子量较大($M_w=1000\sim500\ 000$)吸附时作用较慢，同传质步骤相比有可能成为控制步骤。在吸附剂颗粒孔隙流体中，未结合的吸附质 A 与活性中心 L 之间的相互作用可用下式表示：

吸附质与吸附剂活性基团之间作用方程为：

$$A+L\underset{k_{21}}{\overset{k_{12}}{\rightleftharpoons}}AL$$

此处，AL 表示形成的吸附质-活性中心复合物。假定上式为基元反应，则吸附速率可用二阶可逆速率方程表示：

$$\frac{\partial C_S}{\partial t}=k_{12}C_p(C_r-C_S)-k_{21}C_S \tag{8-27}$$

式中，k_{12}为吸附速率常数；k_{21}为解吸速率常数。

对相互作用速率较快的体系，可假定吸附质在颗粒孔隙中的浓度与在吸附相中的浓度达到瞬间平衡。吸附相中的浓度积累可用下式表示：

$$\frac{\partial C_s}{\partial t}=\frac{\partial f}{\partial C_p}\frac{\partial C_p}{\partial t} \tag{8-28}$$

式中，$C_s=f(C_p)$，表示吸附质在孔隙中的浓度与在吸附相中浓度之间的平衡关系。对 Langmuir 型吸附可表示为：

$$C_s=\frac{K_A C_T C_p}{1+K_A C_p} \tag{8-29}$$

式中，$K_A=k_{12}/k_{21}$，为吸附平衡常数；C_T 为吸附质的饱和吸附量。

实际上，式(8-29)可以由式(8-27)导出，这说明如果作用速率关系满足二级可逆反应，当作用速率很大时，式(8-26)即为无限快速吸附上限。

对瞬时平衡关系，由式(8-28)和(8-29)可得：

$$\frac{\partial C_s}{\partial t}=\frac{C_T K_A}{(1+K_A C_p)^2}\left(\frac{\partial C_p}{\partial t}\right) \tag{8-30}$$

将上式代入式(8-22)，可简化模型计算。

在这些变量中，　$C=C(t)$

$$C_p=C_p(t,r)$$

$$C_s=C_s(t,r)。$$

式(8-20)、(8-22)和(8-27)及其各自的初始、边界条件构成了所论现象的数学模型描述方程组。联立求解即可获得真正的数学模型。不过，像此例所示的一样，有不少现象进行数学模型化时，不能找到输入量与输出量之间的显式关系表达式，只能借助于数值计算，求出一系列数值，在这些数值

结果中隐藏着它们之间的函数关系[5]。在这种情况下，习惯上有时将现象的描述方程组就称之为数学模型。其实，它只能是真正数学模型的基础，或者如本书第1章中所说，称之为基础数学模型。

8.5 包裹酶反应器

a）过程描述

虽然人所共知酶对很多化学及生化反应是一个有效的催化剂，但它在大规模生产中的利用仍然有限，这是因为经济上缺乏竞争力所致。可是近年来，出现一种固定技术即将酶包裹在水溶的聚合物中，酶的包裹膜是半透膜，这样，酶的活性在此过程中会有部分降低。但换句话说，被包裹的酶延长了有效期，即有缓释作用。

凭借酶的催化活性，被酶作用物经历化学转化首先从反应器的主体扩散并经过包裹表面的相对滞流膜。随后，它经多孔的封壳壁渗透进内层空间，在那里它开始进行反应以生成最终产品。同样，生成物质以与此相反的方向，从封壳的内部进入反应器。

通常，反应器在稳态和过渡条件下的生产能力由被作用物浓度降低程度所决定。确定系统效率的诸因素，如酶反应动力学、粒子间的扩散、返混程度和封壳几何尺寸必须予以充分注意。

包裹酶反应器的设计需要很多上述化学和物理机理的知识。能预测酶反应速率常数，被作用物的扩散系数和其他系统参数对最后底物浓度影响的一个定量关系式可以在反应系统的质量守恒原理基础上开发出来。一个成功的数学模型也允许模拟反应器在各种操作模式中的特性。

b）初步分析

模拟的目的是达到能预测在各种操作条件下被作用物的浓度。此问题的数学式等价于一个恰当的物料平衡方程的解。

显然，问题本身不止一个传递或反应过程，而每个过程又须简化为不同的模式。以下引进过程重要性能的诸多模式。

特征——被作用物在反应器内传递模式：

（A1）反应器各组分完全混合；

（A2）反应器各组分无轴向混合(对流传递)；

（A3）对流和湍流扩散相结合的传递。

特征——被作用物从主流液体向封壳内酶相传递模式：

（B1）酶反应；

（B2）酶反应结合半透膜扩散阻力；

（B3）B_2 加上壳内粒子阻力和主流液体与封壳外表面阻力。

特征——酶相内被作用物的反应：

（C1）(常用)Michaelis-Menten 关系式

$$r_i=\frac{k_iC_E}{K_m+C_i}C_i \tag{8-31}$$

式中 k_i——一级反应常数；

K_m——Michaelis 酶反应物常数。

（C2）对应于零级和一级反应时不对称的 Michaelis-Menten 关系式

$$r_i=k_iC_E \qquad \text{当 } C_i\gg k_m \text{ 时} \tag{8-32}$$

以及

$$r_i=\frac{k_iC_E}{K_m}C_i \qquad \text{当 } C_i\ll k_m \text{ 时} \tag{8-33}$$

特征——被作用物的浓度依时性：

（D1）无依赖—稳态；

（D2）依时性—瞬变。

所有的物理量，如扩散和反应速率，均假设在所有论及的模型中为不变常数、常温。

综合各个过程特征的模式在各不同程度描述的模型中，此处仅考虑三个模型：

模型 X：$A_1B_1C_1D_2$

模型 Y：$A_1B_2C_2D_2$

模型 Z：$A_3B_3C_1D_2$

模型 X

反应器特性由于假设反应器内各组分充分混合而理想化。被作用物的浓度假设为几个平均值混合而成，其值等于出口浓度(连续搅拌槽式反应器,CSTR)。

无扩散阻力，底物传递速率由酶相反应控制。其速率假设是 Michaelis-Menten 型。系统在过渡条件下操作。

模型 Y

类似于模型 X，反应器假设为 CSTR 型。底物通过膜扩散并且酶相反应假设控制总速率过程。仅仅考虑有限的几个化学反应速率。假设系统是非稳态。

为了模拟目的，分成下列几个子系统：

子系统 1 由反应器的液相组成。

子系统 2 为膜壁。

子系统 3 表示封壳内部空间。

模型 Z

用轴向分散型描写反应器的流动特性，考虑所有的影响反应速率的阻力。假设 Michaelis-Menten 动力学表达式可以用来描述酶相反应速率。考虑非稳态条件。

类似模型 Y，将系统分成下列几个子系统：

子系统 1 由反应器液相组成，

子系统 2 由围绕封壳的液相层组成，

子系统 3 为壁膜，

子系统 4 表示封壳内部空间。

c）模型开发

对上述三个考虑的模型，描述方程的推导及求解分别予以叙述。

模型 X

根据前述模式，此反应器考虑为一个一体化参数系统。基于整个系统的物料衡算，底物浓度的描述方程可以得到：

$$QC_{i0}-V\varepsilon_E\frac{k_iC_E}{K_m+C_i}C_i=QC_i+V\varepsilon_b\frac{dC_i}{dt} \tag{8-34}$$

式中，ε_E 为酶相体积分率，ε_b 为床空隙度。

初始条件是：　　$C_i=0$　在 $t=0$ 时　　(8-35)

引入无因次变量以简化上述方程：

$$\overline{C}_i=C_i/C_{i0} \tag{8-36}$$

$$\bar{\tau}=tQ/V\varepsilon_b \tag{8-37}$$

于是，式(8-34)和式(8-35)变为下列无因次形式：

$$\frac{d\overline{C}_i}{d\bar{t}}+\overline{C}_r=1-\frac{\overline{k}_i\overline{C}_i}{\overline{K}_m+C_i} \tag{8-38}$$

以及　　$\overline{C}_i=0$，在 $\bar{t}=0$ 时　　(8-39)

式中，$\overline{K}_m$ 和 $\overline{k}_i$ 两个无因次数群定义如下：

$$\overline{k}_i=\frac{k_1\varepsilon_EC_EV}{QC_{i0}} \tag{8-40}$$

以及

$$\overline{K}_m=\frac{K_m}{C_{i0}} \tag{8-41}$$

文献[6]中有此方程的解析解。此处仅讨论酶相的零级和一级反应两种情况[参见式(8-32)及式(8-33)]。零级反应时其无因次控制方程退化为：

$$\frac{\mathrm{d}\bar{C}_i}{\mathrm{d}\bar{t}}+\bar{C}_i=1-\bar{k}_i \tag{8-42}$$

此式可由分离变量法求解。积分并代入初始条件，则得：

$$\ln\frac{1-\bar{k}_i}{1-\bar{k}_i-\bar{C}_i}=\bar{t} \tag{8-43}$$

由此底物的浓度的显式表达式可以立刻写为：

$$\bar{C}_i=(1-\bar{k}_i)[1-\exp(-\bar{t})] \tag{8-44}$$

注意上式只对

$$\bar{k}_i\leqslant 1 \tag{8-45}$$

时才有物理意义。

对一级反应，其无因次控制方程[式(8-38)]简化为：

$$\frac{\mathrm{d}\bar{C}_i}{\mathrm{d}\bar{t}}=1-\bar{C}_i\left(\frac{\bar{k}_i}{\bar{K}_m}+1\right) \tag{8-46}$$

结合初始条件方程[式(8-39)]，上式的解析解为：

$$\ln\left|1-\bar{C}_i\left(1+\frac{\bar{k}_i}{\bar{K}_m}\right)\right|-\lim_{\bar{C}_i\to 0}\left\{\ln\left|1-\bar{C}_i\left(1-\frac{\bar{k}_i}{\bar{K}_m}\right)\right|\right\}$$

$$=-\bar{t}\left(1+\frac{\bar{k}_i}{\bar{K}_m}\right) \tag{8-47}$$

注意上式中的第二项趋近于零，作用物的无因次浓度的显式表达式在所讨论条件下可以得到如下：

$$\bar{C}_i=\frac{\bar{K}_m}{\bar{K}_m+\bar{k}_i}\left\{1-\exp\left[-\frac{\bar{t}(\bar{k}_i+\bar{K}_m)}{\bar{K}_m}\right]\right\} \tag{8-48}$$

如要比较各种过渡区 Michaelis-Menten 动力学零级和一级近似的浓度剖面，可以参考文献[9]。

模型 Y

反应器仍然考虑为一体化参数系统，因此，作用物浓度的描述方程可以利用宏观平衡(子系统 1)得到：

$$QC_{i0}-V\varepsilon_E\left(\frac{k_iC_E}{K_m+C_{i,3}}\right)C_{i,3}=QC_{i,1}+V\varepsilon_b\frac{\mathrm{d}C_{i,3}}{\mathrm{d}t} \tag{8-49}$$

初始条件：　　$C_{i,1}=0$，在 $t=0$ 时　　(8-50)

上式只有当酶相中底物浓度 C_E 已知时才可求出 C_i，C_E 可由子系统壳内空间周围的底物组分的物料衡算求得。由于壳内浓度没有空间变化，所以，一个宏观的衡算可以利用。底物进入系统的速率等于反应消耗的速率，故有：

$$a_{23}D_i\frac{\partial C_{i,2}}{\partial r}\bigg|_{r=\kappa R}=\varepsilon_E\frac{k_1C_E}{K_m+C_{i,3}}C_{i,3} \qquad (8\text{-}51)$$

式中，a_{23}为每单位床体积的膜内面积的比表面。

但是，上式关于 $C_{i,3}$的解仅当梯度$\dfrac{\partial C_{i,2}}{\partial r}\bigg|_{r=\kappa R}$。

在相界面是已知时始可得到，这需要知道横向膜壁的浓度剖面。于是，考虑子系统 2 的物料衡算。

由于扩散阻力的缘故，一个径向浓度分布在壳壁内部已经形成。对给定的球形封壳，底物的连续性方程简化为：

$$\frac{d}{dr}\left[r^2D_i\frac{dC_{i,3}}{dt}\right]=0 \qquad (8\text{-}52)$$

容易写出其边界条件：

$$C_{i,2}=C_{i,1} \qquad \text{在 } r=R \text{ 处}$$
$$C_{i,2}=C_{i,3} \qquad \text{在 } r=\kappa R \text{ 处} \qquad (8\text{-}53)$$

必须注意模型 Y 的子系统(1)和(2)的模型方程显著不同：式(8-49)对应于过渡条件下的宏观描述，而式(8-52)是一个一维(面均)稳态方程。关于时间变量重要性的如此的不一致导致描述的拟稳态。

为了寻求各个模型方程的解，下面作因次转换。除了模型 X 情况下关于浓度和时间的无因次变量继续使用外，另加一个新的无因次变量：

$$\bar{r}=r/R \qquad (8\text{-}54)$$

描述方程式(8-49)，(8-50)，(8-52)以及(8-53)的无因次

形式可以得到如下：

$$\frac{\mathrm{d}\bar{C}_{i,1}}{\mathrm{d}t}=1-\bar{C}_i-\bar{k}_i\frac{\bar{C}_{i,3}}{\bar{K}_m+\bar{C}_{i,3}} \tag{8-55}$$

$$\bar{C}_{i,1}=0 \quad \text{在}\bar{t}=0\ \text{处} \tag{8-56}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\bar{C}_{i,2}}{\mathrm{d}\bar{r}}\right|_{\bar{r}=k}=\frac{\bar{C}_{i,3}}{\bar{K}_m+\bar{C}_{i,3}}\frac{1}{\alpha} \tag{8-57}$$

式中，

$$\alpha=\frac{C_{i0}a_{23}D_i}{R\varepsilon_E k_i C_E} \tag{8-58}$$

以及

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{r}}\left[\bar{r}^2D_i\frac{\mathrm{d}\bar{C}_{i,2}}{\mathrm{d}\bar{r}}\right]=0 \tag{8-59}$$

$$\bar{C}_{i,2}=\bar{C}_{i,1} \quad \text{在}\bar{r}=1\ \text{处}$$

$$\bar{C}_{i,2}=\bar{C}_{i,3} \quad \text{在}\bar{r}=\kappa\ \text{处} \tag{8-60}$$

首先，对式(8-59)积分两次，得

$$\bar{C}_{i,2}=-\frac{C_1}{\bar{r}D_i}+C_2 \tag{8-61}$$

然后利用上述边界条件求出积分常数，则有

$$\bar{C}_{i,2}=\frac{\bar{C}_{i,1}-\bar{C}_{i,3}}{1-\kappa}\kappa\left\{\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{\kappa}\right)-\frac{1}{\bar{r}}\right\}+\frac{1}{2}(\bar{C}_{i,1}+\bar{C}_{i,3}) \tag{8-62}$$

膜壁内底物$\bar{C}_{i,2}$浓度剖面的表达式简化了内表面上浓度梯度的确定：

$$\left.\frac{\mathrm{d}\bar{C}_{i,2}}{\mathrm{d}\bar{r}}\right|_{\bar{r}=\kappa}=\frac{\bar{C}_{i,1}-\bar{C}_{i,3}}{1-\kappa}\frac{1}{\kappa} \tag{8-63}$$

将式(8-63)代入式(8-57)，随后解出酶相底物浓度，一个局部修正结果为$\bar{C}_{i,3}$的二次方程：

$$\overline{C}_{i,3}^2+C_{i,3}\left(\overline{K}_m-\overline{C}_{i,1}+\frac{1}{\beta}\right)-\overline{C}_{i,1}\overline{K}_m=0 \qquad (8\text{-}64)$$

式中

$$\beta=\frac{\alpha}{\kappa(1-\kappa)} \qquad (8\text{-}65)$$

正根即其解：

$$\overline{C}_{i,3}=\frac{1}{2}\left\{-\overline{K}_m+\overline{C}_{i,1}-\frac{1}{\beta}+\left[\left(\overline{K}_m-\overline{C}_{i,1}+\frac{1}{\beta}\right)^2+4\,\overline{K}_m\,\overline{C}_{i,1}\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \qquad (8\text{-}66)$$

将此式与式(8-55)和式(8-56)联立时，无法求出解析解，只能用 Range-Kutte 法求出数值解。反映各种参数影响的例证性的解可以在文献[6]中找到。

模型 Z

假设为轴向扩散模型，其中浓度受小尺寸湍流混合的影响。子系统 1 的描述方程可写为：

$$C_b\frac{\partial C_{i,1}}{\partial t}+v_s\frac{\partial C_{i,1}}{\partial Z}=D_L\frac{\partial^2 C_{i,1}}{\partial Z^2}+r_i \qquad (8\text{-}67)$$

式中，v_s 为表面速度；D_L 为轴向扩散系数。

注意 $C_{i,1}$ 为反应器空间空隙中底物浓度。其边界条件为：

$$v_s C_{i,0}=v_s C_{i,1}-D_L\frac{\partial C_{i,1}}{\partial Z} \quad \text{在 } Z=0 \text{ 处} \qquad (8\text{-}68)$$

$$\frac{\partial C_{i,1}}{\partial Z}=0 \quad \text{在 } Z=L \text{ 处} \qquad (8\text{-}69)$$

底物消失速率依赖于子系统 2 和 3 提供的传递阻力。各阻力的倒数代数和构成了此两子系统中的传质阻力：

$$k_c=k_{c_2}+k_{c_3} \qquad (8\text{-}70)$$

于是，物质消失速率变成：

$$r_i=k_C a(C_{i,1}-C_{i,3}|_{r=\kappa R}) \qquad (8\text{-}71)$$

式中，a 为膜(每单位床体积的外表面)的比表面，而 $C_{i,3}|_{r=\kappa R}$ 是膜内表面上的底物浓度。但是，r_i 无法求出，除非浓度 $C_{i,3}|_{r=\kappa R}$ 已知。由于壁壳和壳内流体之间假设无界面阻力，亦即：

$$C_{i,3}=C_{i,4} \qquad \text{在 } r=\kappa R \text{ 处} \tag{8-72}$$

故在子系统 3 和 4 之间的界面底物浓度可由壳内空间底物的物料衡算确定。球形条件下，扩散通常和底物消失速率之间的等式可写为：

$$\frac{D_{i,4}}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial C_{i,4}}{\partial r}\right]=\frac{k_i C_E C_{i,4}}{K_m+C_{i,4}} \tag{8-73}$$

边界条件：

$$\frac{\partial C_{i,4}}{\partial r}=0 \qquad \text{在 } r=0 \text{ 处} \tag{8-74}$$

$$D_{i,4}\frac{\partial C_{i,4}}{\partial r}=k_C(C_{i,1}-C_{i,3}),\ \text{在 } r=\kappa R \text{ 处} \tag{8-75}$$

将模型方程无因次化，引用先前引入的无因次变量以及

$$\overline{Z}=\frac{Z}{L} \tag{8-76}$$

则从模型方程[式(8-67)到(8-69)以及(8-73)到(8-75)]均转换成无因次形式如下：

式(8-67)：

$$\frac{\partial \overline{C}_{i,1}}{\partial \overline{t}}+\frac{\partial \overline{C}_{i,1}}{\partial \overline{Z}}=\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 \overline{C}_{i,1}}{\partial \overline{Z}^2}-\alpha(\overline{C}_{i,1}-\overline{C}_{i,3}) \tag{8-77}$$

式(8-68)：

$$\frac{1}{Pe}\frac{\partial \overline{C}_{i,1}}{\partial \overline{Z}}=\overline{C}_{i,1}-1, \qquad \text{在 } Z=0 \text{ 处} \tag{8-78}$$

式(8-69)：

$$\frac{\partial \bar{C}_{i,1}}{\partial \bar{Z}}=0 \qquad \text{在 } Z=1 \text{ 处} \tag{8-79}$$

式(8-73)

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[\bar{r}^2\frac{\partial \bar{C}_{i,4}}{\partial \bar{r}}\right]=\frac{\bar{C}_{i,4}\alpha}{1+\frac{\bar{C}_{i,4}}{\bar{K}_m}} \tag{8-80}$$

式中，$\alpha=\dfrac{k_i C_E R^2}{K_m D_i}$，$Pe=\dfrac{v_s L}{D_L}$

式(8-74)
$$\frac{\partial \bar{C}_{i,4}}{\partial \bar{r}}=0, \text{ 在 } r=0 \text{ 处} \tag{8-81}$$

式(8-75)
$$\frac{\partial \bar{C}_{i,4}}{\partial \bar{r}}=Sh(\bar{C}_{i,1}-\bar{C}_{i,3}) \quad \text{在 } r=\kappa \text{ 处} \tag{8-82}$$

式中，$Sh=\dfrac{k_C R}{D_i}$ 在$\bar{r}=\kappa$ 处

勿容讳言，这一组无因次的模型方程只能利用数值解，其解题技巧可参阅文献[7]或其他计算数学书籍。

符 号 说 明

A 吸附质[-]
b 两板间隙[m]
C 浓度[kmol/m³,kg/m³]
C_F 纤维蛋白个数[-]
D 扩散系数[m²/s]
H 红细胞压积[%]
k_i 膜传质系数[kmol/(s·m²)]
K_m 酶反应的梅氏常数[kmol/m³]
k 反应速率常数[kmol/(m²·s)]
k 传质系数[m/s]
L 活性中心[-]
p 压力[Pa]
Q 流量[m³/s]
R 半径[m]
r 径向位置[m]
反应速率[kmol/s]
S 饱和度[%]
t 时间[s]

u 流速[m/s]

v 速度[m/s]

V 体积[m^3]

y 距离[m]

希腊字母

α 参数[-]

β 参数[-]

$\dot{\gamma}$ 剪切速率[s^{-1}]

ε 体积分率，空隙率[-]

ζ 无因次变量[-]

η 无因次距离[-]

θ 无因次分压[-]

κ 半径比[-]

μ 牛顿粘度[Pa·s]

下标

1 正反应的

2 逆反应的

12 吸附的

21 解吸的

A 吸附平衡的

b 床层的

c casson 的

E 酶相的

f 外表面的

i 组分的

L 轴向的

m 平均的

P 血浆的，空隙的

S 饱和的，表面的

T 饱和吸附的

w 壁面的

y 屈服的

参 考 文 献

[1] 江体乾，唐寅南．血液流动的数学模型．华东化工学院学报，1983，1(45)

[2] 江体乾著．工业流变学．北京：化学工业出版社，1995

[3] 姜志恒，唐寅南，包锦明，江体乾．平板膜式氧合器中氧传质过程的数学模型．化工学报，1987(4)：394～405

[4] 方波，江体乾．人体血液胆固醇净化过程的研究进展．医学生物物理学，1994(6)：31～41

[5] 方波．血液低密度脂蛋白体外净化过程的研究[博士学位论文]．华东理工大学，1995

[6] Choi D S，Fan L T. J Appl Chem Biotech，1973，23：531

[7] Ramachandran P A. J Appl Chem Biotech，1974，24：265

[8] Stanislow J F. Mathematical Modeling of Transport Phenomena. Anu Arbor Science, 1982

[9] Rony P R. Biotechol Bioeng. 1971, 13: 431

第 9 章　聚合物加工中的模型

9.1　引　　言

在上一章中，介绍了几个有关生物、医学工程方面的数学模型，有作者亲自参加制定的，也有取自文献中的工作，总的目的都是举几个范例，也许读者能从中学习点建模技巧，但这只对熟悉这类工艺过程的读者有用。为了能使更大范围的读者，即不同专业的大学毕业生或在校高年级生得益，本章将对聚合物材料加工过程中的建模思路和方法举例说明，以期能对蓬勃发展的材料学科有所贡献，因为材料学科和上一章介绍的与生命学科有关内容，都是 21 世纪的科技进步的重要支柱，不容忽视。

本章仍然维持本书的一贯风格，选择几个重要过程为例说明其各自的建模方法和结果。

9.2　薄 膜 吹 塑

a）过程描述

本节将说明数学模型在工业上空心薄膜吹制过程中的应用。吹膜是重要和基本的聚合物加工单元操作之一。

聚合物材料被送入挤出机，在那里熔化并被送入空心圆形口模，如图 9-1 所示。聚合物熔体在压力驱动下流经空心圆封头，吹入空气形成一个薄壁管并且被转动的轮子进一步拉伸。空气由口模中央通道供给并继续膨胀薄壁管。接下来，此

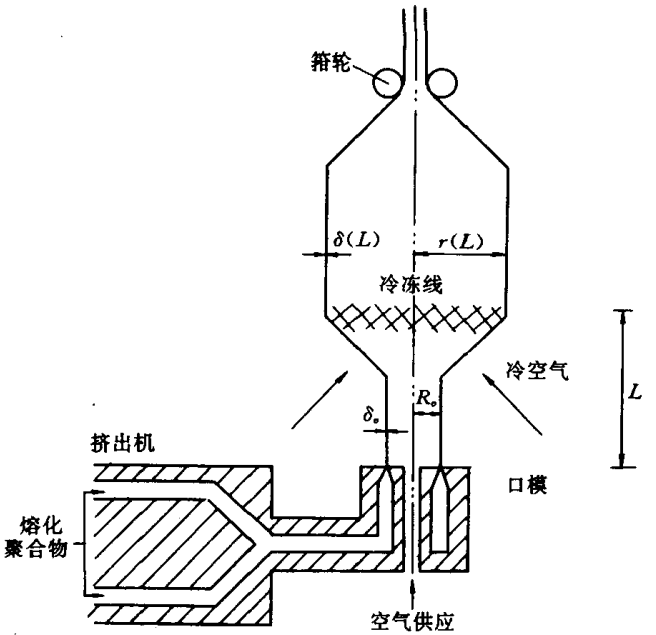


图 9-1　薄膜吹塑过程示意图

管被冷却并固化成一个管状薄膜。过程须控制压力区、加热区域以及薄膜速度。产品特性也取决于设备设计参数、聚合物熔体的性质以及熔体固化条件。

本分析的目的是预测管状薄膜如下的两个重要的特性：吹胀比，定义为最后的薄膜直径 $r(L)$和口模直径 R 之比，亦即 $r(L)/R$；以及厚度降低度，定义为最初薄膜厚度 δ_0 和最后薄膜厚度 $\delta(L)$之比，亦即 $\delta_0/\delta(L)$。两个量，吹胀比和厚度降低度，都必须以各操作变量，设备参数和流体性质各项予以表达。当考虑子系统时，输入量的阐明被延缓至下一个模拟步骤。

b）初步分析

审查吹膜过程，建议其设备分成两个主要单元：挤出口模子系统和吹塑子系统。

在本书第5章中曾强调过，细分子系统的一个原则是信息的下游必须清楚明显。在现在所论情况遇到了困难，因为两个子系统相互交叉在一起(椭圆边值问题)。由于薄膜的性质在很大程度上决定于熔体固化的条件，忽略返回的信息流，就像模拟初始水平中的一个近似。

因此，在此例中，仅仅考虑一个口模和凝固线之间的自由流量(子系统2)。

对给定的子系统其已有的信息将组成如下形式的输入和输出量：

1. 输入量

- 聚合物熔体的流率 Q；
- 初始管状薄膜尺寸：厚度 δ_0 和半径 R_0；
- 供给管子的空气流量表示成横过气泡的压力差 Δp；
- 驱动转轮所需要的力 F_z；
- 聚合物熔体的粘度 μ；
- 凝固线距离，$Z=L$。

2. 输出量

- 薄膜厚度 $\delta(z)$，即用以决定厚度降低度 $\delta_0/\delta(L)$；
- 气泡半径 $r(z)$，为决定吹胀比 $r(L)/R_0$ 所需。

注意，供应空气(压力降 Δp)是为了达到指定的胀吹比。如此的一个信息循环流是常规的模拟框图。最后必须指出的是，本分析所考虑的为一个常温条件下的模型。

c) 模型开发

薄膜吹塑过程的初步分析中已经确立了其主要目标为开发一个关于气泡半径和膜厚的有效公式。这两个量均由气泡

的大小和形状来确定，自然，它们又与作用在管状薄膜的力的相对大小有关。因此，模型方程可以从动量守恒原理加以推导。但是，在这一分析阶段，输出量不能与基础变量建立任何正式关系。数学模型于是可以由衡算当聚合物薄膜形成时作用在此膜上的外力着手建立。

因为管状薄膜的弯曲不平，在写出平衡方程式以前，作用力分解成几个相当的分量。考虑轴向和垂直于薄膜方向。

轴向(z 坐标)力平衡建立在一个有限大小的由管状薄膜一段形成的控制体范围内。此体积由两个想象平面所界定，一个是垂直于纵轴的过凝固线而另一个为某个任意距离 z(参见图 9-1)。

作用力 F_z 必与压力差和粘性力的轴向分量相平衡，而粘性力轴向分量可以由每单位长度上的法向应力 δp_{11} 来表达，即

$$F_z=\pi[r^2(L)-r^2(z)]\Delta p+2\pi r(z)\delta p_{11}\cos\phi \qquad (9\text{-}1)$$

在写薄膜法向力平衡之前，十分方便地引入一个直角坐标系 ξ_i；它随流体速度一起运动(参见图 9-2)。

控制体现在由一个薄膜空心环的一段组成，即 $\delta \mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_3$(参见图 9-3)。作用在此单元上的力平衡表现为压力和投影在坐标 ξ_2 上的粘性力相等。压力可以写成如下形式：

$$F_p=\Delta p\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_3 \qquad (9\text{-}2)$$

粘性力与两个法向应力 p_{11} 和 p_{33} 有关；注意到 $p_{22}=0$，即在自由面上的应力等于大气压力。对于所论的控制体，F_{p33} 由 p_{33}(横截面方向)和面积 $\delta \mathrm{d}\xi_1$ 的乘积来决定：

$$F_{p33}=2p_{33}\delta \mathrm{d}\xi_1 \qquad (9\text{-}3)$$

显然，我们考虑的为控制体的两个平行平面，因此，上式中乘以 2。

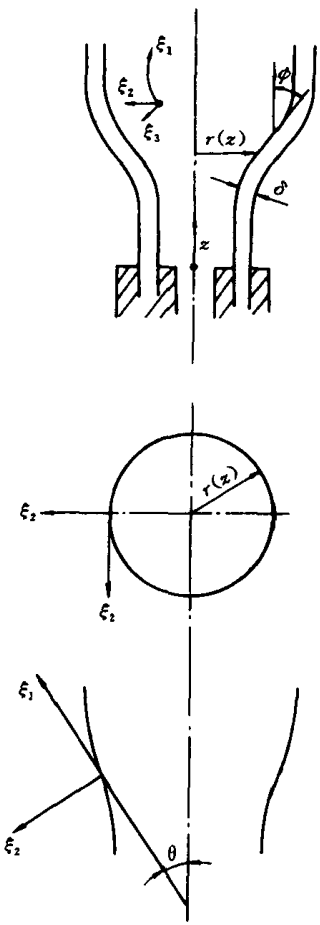


图 9-2　气泡变形和坐标系的详细描述

力 F_{p33} 在 ξ_2 方向上的法向投影可在所考虑的几何图形基础上予以确定(参见图 9-4)：

$$F_{p33,\xi 2}=2p_{33}\delta \mathrm{d}\xi_1 \sin\frac{\mathrm{d}\theta_1}{2} \tag{9-4}$$

将 sin 函数用其宗量作近似处理(角 $\mathrm{d}\theta$ 非常小)并且用等式：

$$\mathrm{d}\theta_1=\frac{\mathrm{d}\xi_3}{r_{\xi 3}} \tag{9-5}$$

于是，式(9-4)变成

$$F_{p33,\xi 3}=\frac{p_{33}\delta \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_3}{r_{\xi 3}} \tag{9-6}$$

因此，力 F_{p11} 在 ξ_2 方向上的分量为：

$$F_{p11,\xi 2}=\frac{p_{11}\delta \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_3}{r_{\xi 1}} \tag{9-7}$$

薄膜法向上的力平衡方程现在可以写为等于压力 F_p(式 9-2)以及粘性力 $F_{p33,\xi 2}$ 和 $F_{p11,\xi 2}$[式(9-6)和式(9-7)]之和。根据这个关系，横过薄膜厚度的压力差在力平衡的条件下可得：

$$\Delta p=\left[\delta\frac{p_{11}}{r_{\xi 1}}+\frac{p_{33}}{r_{\xi 3}}\right] \tag{9-8}$$

此处两个半径 $r_{\xi 1}$ 和 $r_{\xi 2}$ 可由柱坐标表达如下：

$$r_{\xi 1}=\sec^3\theta/\mathrm{d}^2r/\mathrm{d}z^2 \tag{9-9}$$

以及

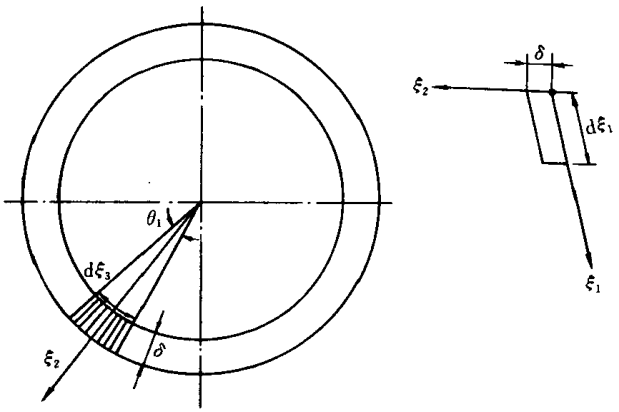


图 9-3　为开发描述方程的控制体示意图

$$r_{\xi 3}=r\sec\theta \quad (9\text{-}10)$$

式(9-2)、(9-8)表示两个力平衡，必须进一步重排才能产生管状袋半径 $r(z)$和膜厚 $\delta(z)$径向变化的模型方程。拖力 F_z 和压力差常常详细说明。两个法向应力分量 p_{11}和 p_{33}必须用本构关系予以表达(作为聚合物材料的一级近似假设为牛顿流体)。对所论情况下的流变方程由两个自变量 $r(z)$和 $\delta(z)$表达如下：

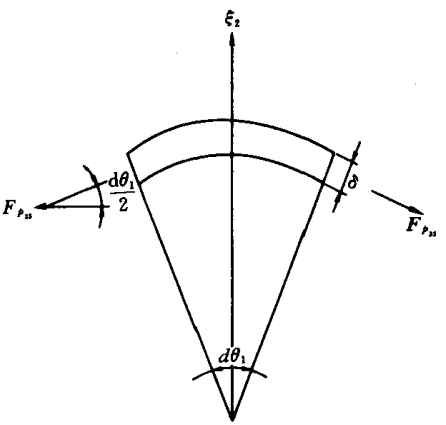


图 9-4　管形薄膜上的力平衡草图

$$p_{11}=-\frac{\mu Q\cos\theta}{\pi r\delta}\left(\frac{2}{\delta}\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}z}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}\right) \quad (9\text{-}11)$$

以及

$$p_{33}=\frac{\mu Q\cos\theta}{\pi r\delta}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}-\frac{1}{\delta}\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}z}\right) \tag{9-12}$$

力平衡式以及流变方程式(9-1)、(9-8)、(9-11)和(9-12)相结合并代入两个半径[式(9-9)和(9-10)]，经过一些整理后得：

$$F_z=2\pi r\delta\left[-\frac{\mu Q\cos\theta}{\pi\delta}\left(\frac{2}{\delta}\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}z}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}\right)\right]\cos\theta+$$
$$\pi[r^2(L)-r^2(z)]\ \Delta p \tag{9-13}$$

和

$$\Delta p=-\frac{\mu Q\cos\theta}{\pi r}\left(\frac{2}{\delta}\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}z}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}\right)\left[\frac{\sec^2\theta}{\dfrac{\mathrm{d}^2r}{\mathrm{d}z^2}}\right]+$$
$$\frac{\mu Q\cos\theta}{\pi r}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}-\frac{1}{\delta}\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}z}\right)\frac{1}{r\sec\theta} \tag{9-14}$$

式(9-13)和式(9-14)为微分方程，对薄膜半径 $r(z)$ 和厚度 $\delta(z)$ 可以解出。

在口模排出口膜半径假设与口模开口相等：

$$r=R_0 \qquad \text{在 } z=0 \text{ 处} \tag{9-15}$$

以及最初膜厚度假设已经确定，故而

$$\delta=\delta_0 \qquad \text{在 } z=0 \text{ 处} \tag{9-16}$$

在凝固线气泡的曲率消失：

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}=0 \qquad \text{在 } z=L \text{ 处} \tag{9-17}$$

引入无因次变量以简化模型方程的复杂性。根据前已指出的方法(参阅第5章)，引入下列变换式：

$$\bar{\delta}=\frac{\delta}{R_0} \tag{9-18}$$

$$\bar{r}=\frac{r}{R_0} \tag{9-19}$$

$$\bar{z}=\frac{z}{R_0} \tag{9-20}$$

将式(9-18)～(9-20)代入系统的数学描述产生如下的模型方程式：

$$\frac{1}{\bar{\delta}}\frac{\mathrm{d}\bar{\delta}}{\mathrm{d}\bar{z}}=-\frac{1}{2\bar{r}}\frac{\mathrm{d}\bar{r}}{\mathrm{d}\bar{z}}-\frac{1}{4\cos^2\theta}[N_1-N_2(N_3^2-\bar{r}^2)] \tag{9-21}$$

以及

$$2\bar{r}^2[N_1+N_2(\bar{r}^2-N_3^2)]\frac{\mathrm{d}^2\bar{r}}{\mathrm{d}\bar{z}^2}$$
$$=6\frac{\mathrm{d}\bar{r}}{\mathrm{d}\bar{z}}+\frac{\bar{r}}{\cos^2\theta}[N_1-N_2(N_3+3\bar{r}^2)] \tag{9-22}$$

和边界条件：

$$\bar{r}=1 \quad 在\bar{z}=0$$
$$\delta=\frac{\delta_0}{R_0} \quad 在\bar{z}=0$$
$$\frac{\mathrm{d}\bar{r}}{\mathrm{d}\bar{z}}=0 \quad 在\bar{z}=\frac{L}{R_0} \tag{9-23}$$

式中，无因次数群 N_1，N_2 和 N_3 定义如下：

$$N_1=\frac{F_zR_0}{\mu Q},\quad N_2=\frac{\pi R_0^3\Delta z}{\mu Q},\quad N_3=\frac{r(L)}{R_0}$$

微分方程[式(9-21)和(9-22)]为非线性并且因为 $1/\cos^2\theta=1+(\mathrm{d}\bar{r}/\mathrm{d}\bar{z})^2$，在用 $\mathrm{d}\bar{r}/\mathrm{d}\bar{z}$ 代替 $\cos^2\theta$ 之后对 $\bar{\delta}(z)$ 和 $\bar{r}(z)$ 可解。当然，这需要规定无因次数群 N_1，N_2 和 N_3。

薄膜厚度和半径轴向的变化允许在凝固线上确定这两个量，而接下来吹胀比和厚度降低度即可确定。

9.3 纤维纺丝

a) 过程描述

在纤维纺丝过程中，聚合物物料先熔化，随后在喷丝头挤压出来。熔体经过一预冷介质逐渐固化形成丝线。近年来，经过不断的努力改进了已有技术并且引进了新技术，可以大大地改善纤维的力学性质。由于过程过份复杂，并不是对每一件纺丝流体都合适。进一步的技术进步依赖于能在更大范围内找到一个准则，用以确定一个给定的流体是否合适或潜在地合适。如此的一个准则理应包括纺丝材料的流变性质和力学性质的影响，操作变量的影响(拖力,冷区)，设备的设计特性(孔大小和形状)，等等。

纤维纺丝过程的一个有趣的特性是挤出胀大。流体从口模开口处流出后膨胀到一个这样的程度，即纤维丝的直径超过口模自己的尺寸。这个现象可归因于流体的弹性。

熔体纺丝过程受很多因素影响，通常可归纳为三组：

1. 聚合物的流变性质；

2. 传热过程特性；

3. 设计参数。

冷却阶段是纤维纺丝过程的一个重要部分，如冷却速率对最终产品的力学性质有举足轻重的影响。

纤维纺丝的工程分析主要回答这样一些问题，如流体的潜在可纺性怎样？流动稳定性以及在纤维形态或力学性质和操作条件之间的关系。但是根据现有的知识，这些目标似乎十分模糊。

为估计流体的潜在可纺性，模型方程将预测几个量，如开始拖力，纺丝张力，丝条半径，最大伸长速率与流体性质之间的关系，以及设计和操作参数。

b) 初步分析

考查的目标均基于基础物理定义。

拖力由丝条半径以及丝条末端张力所确定。最大伸长速率定义为末端速度梯度。丝条半径与轴向速度在流动方向上的变化有关。由于张力也与流体速度梯度有关，所以，所有的输出变量的模型方程必须解运动方程以求出速度剖面。

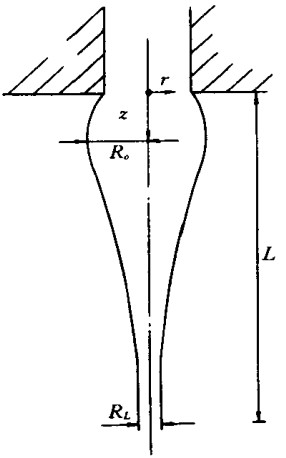


图 9-5　纤维形变过程示意图

本分析限于丝条如下区域，以圆截面(参见图 9-5)和一个在流动方向逐渐缩小直径为标志。最初直径可以一个试验来确定或者假设等于口模尺寸。丝条本体在径向的速度变化比起流动方向上的速度变化并不重要。

在模拟的最初阶段，其流变性质假设为牛顿流体，表面和重力的影响忽略不计。假设稳态和等温。大多数物料可以利用润滑近似(参见第 3 章)。

c) 模型开发

根据以上定义，输出量的数学公式化对象：

卷绕力：

$$F=\pi R_L^2 p_{zz} \qquad \text{在 } z=L \text{ 处} \tag{9-24}$$

式中，p_{zz}是丝条末端张力，必须首先与基本变量相联系。对牛顿流体，法向应力分量 p_{zz}可以表示为：

$$p_{zz}=p-2\mu\frac{\partial V_z}{\partial z} \tag{9-25}$$

式中，p 为各向同性压力，对不可压缩流体定义为平均法向应力。由于法向应力分量的矩阵对角线元素仅有一个非零值($p_{yy}=p_{xx}=0$)，张应力可以用式(9-25)为基点予以表达，即

$$p_{zz}=3\mu\frac{\partial V_z}{\partial z} \tag{9-26}$$

此外，最大伸长速率 SR，简单地以末端速度梯度表达：

$$SR=\frac{\mathrm{d}V_z}{\mathrm{d}z}\qquad \text{在 } z=L \text{ 处} \tag{9-27}$$

合适的丝条半径公式应反映速度在不同横截面上的变化，因此，对系统的有限部分，可以从宏观连续性方程加以推导，即

$$\pi R^2(z)V_z(z)=\pi R_0^2V_0 \tag{9-28}$$

于是

$$R(z)=\frac{R_0V_0^{1/2}}{V_z^{1/2}} \tag{9-29}$$

检查式(9-24)、(9-26)、(9-27)以及式(9-29)证实过程仿真在初步分析中指出的水平需要运动丝条的速度剖面 $V_z(z)$ 的信息。于是，回想解 Navier-stokes 方程并结合式(9-26)速度函数以及速度梯度[式(9-27)、(9-29)]。

如果研究各种形式的流体本构特性的话，那么运动方程首先要简化成能反映过程的特性，即代入合适的本构关系。虽然在本例中简化为牛顿流体，但还是给出一个一般式如下。

已经注意过在 z 和 r 方向的速度变化(参见图 9-5)，虽然 r 方向的变化较为次要。接下来，仅仅两个应力分量 p_{zz} 和 p_{rz} 仍留在运动方程(柱坐标)中(此处用的是柱坐标)：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rp_{rz})+\frac{\partial p_{rz}}{\partial z}=0 \tag{9-30}$$

自变量在径向较次要的变化，可以用面积分予以近似：

$$2\pi\int_0^R\frac{\partial}{\partial r}(rp_{rz})\mathrm{d}r+2\pi\int_0^R\frac{\partial p_{zz}}{\partial z}r\mathrm{d}r=0 \tag{9-31}$$

上式中第一个积分立即可以写成：

$$\int_0^{Rp_{rz}\cdot R} \mathrm{d}(rp_{rz}) = Rp_{rz}|_R \tag{9-32}$$

上式的第二个积分可以分为两项：

$$\int_0^R \frac{\partial}{\partial z}(rp_{zz})\mathrm{d}r = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\int_0^R rp_{zz}\mathrm{d}r - Rp_{zz}|_R \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}z} \tag{9-33}$$

忽略应力分量 p_{zz}(一个丝条弱函数)的径向变化，使左边第一项积分容易做，变成为 $\mathrm{d}/\mathrm{d}z[p_{zz}R^2/2]$；随后与上述方程中第二项相结合，结果得：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[p_{zz}\frac{R^2}{2}\right] - Rp_{zz}|_R \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}z} = \frac{R^2}{2}\frac{\mathrm{d}p_{zz}}{\mathrm{d}z} \tag{9-34}$$

将式(9-32)、(9-34)代入式(9-31)，得：

$$Rp_{zz}|_R + \frac{R^2}{2}\frac{\mathrm{d}p_{zz}}{\mathrm{d}z} = 0 \tag{9-35}$$

为了求速度剖面，将本构关系式(9-25)代入式(9-35)。在两个方程结合之前，将应力分量 $p_{rz}|_R$ 表示为 p_{zz} 函数是有好处的。

丝条表面的剪应力分量 p_{rz} 表达式的详细推导可随处找到[2]，本书仅披露其基本步骤。由于系统与周围流体相互影响而且表面张力的影响已被忽略，无有限的应力作用在自由边界，于是：

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{n} = 0 \tag{9-36}$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 为向外的法向向量。

不难看出，$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{n}$ 向量的 z 分量是：

$$p_{rz}\cos\alpha + p_{zz}\sin\alpha = 0 \tag{9-37}$$

从物理上可以证明，p_{zz} 存在一个有限值并且剪应力分量 p_{rz} 可以用方程(9-37)表达如下：

$$p_{rz}|_R = -\tan\alpha p_{zz} \tag{9-38}$$

从几何上考虑，则有：

$$\frac{dR}{dz}=-\tan\alpha \tag{9-39}$$

式(9-38)和(9-39)提供了两个应力张量分量之间的关系。现在式(9-35)可以改写为：

$$R\frac{dR}{dz}p_{zz}+\frac{R^2}{2}\frac{dp_{zz}}{dz}=0 \tag{9-40}$$

这是运动方程，在代入本构方程式(9-26)和式(9-29)之后，可以解出速度剖面。完成这两个代入置换后，式(9-40)变为

$$\frac{d^2V_z}{dz^2}-\frac{1}{V_z}\left\{\left(\frac{dV_z}{dz}\right)^2\right\}=0 \tag{9-41}$$

为便于积分，式(9-41)可以重写成如下形式：

$$\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{V_z}\frac{dV_z}{dz}\right)=0 \tag{9-42}$$

解的边界条件：

$$V_z=V_0 \quad \text{在 } z=0 \text{ 处}$$

$$V_z=V_L \quad \text{在 } z=L \text{ 处}$$

对式(9-42)进行两次积分得：

$$V_z=C_2\exp(C_1z) \tag{9-42a}$$

在求出积分常数后，即可求得面均速度剖面：

$$V_z=V_0\exp\left(\frac{z}{L}\ln\frac{V_L}{V_0}\right) \tag{9-43}$$

将速度和速度梯度代入相应的表达式中，即可得所求量的数学公式：

卷绕力 $$F=\frac{3\pi R_L^2\mu V_L}{L}\ln\frac{V_L}{V_0} \tag{9-44}$$

最大伸长率 $$SR=\frac{V_L}{L}\ln\frac{V_L}{V_0} \tag{9-45}$$

丝条半径 $$R(z)=R_0\exp\left(-\frac{z}{2L}\ln\frac{V_1}{V_0}\right) \tag{9-46}$$

方程式(9-44)、(9-45)及(9-46)表示所述问题的解。

最后必须指出，上述结果还缺乏实验证实。实验物料的流变性质的测试说明，上述方程的主要不足是假设为牛顿流体特性。但是，模型方程是可以改进的，如果考虑更复杂的流变特性，这样可以得到更加符合实际的模型方程。

此外，作为下一步的过程模拟，还必须考虑冷却效率和系统的稳定性，有兴趣的读者可以一试。

9.4 压　　延

a) 过程描述

压延是一个连续过程，其产品是塑料板材。其主要设备为两个相对转动的轧辊，两轧辊间隙较之辊半径甚小。制造过程中高聚物材料被送入间隙以形成均匀厚度的板材(参见图 9-6)。

理论分析压延过程的主要目的为研究“轧辊弯曲现象”，以及评价过程的经济性。

过程中的物料连续在轧辊上施加力。由于它们只在末端可以牢固地作用，中间段趋向于对物料产生压力，而两辊间便形成了一个不均匀的缝隙。

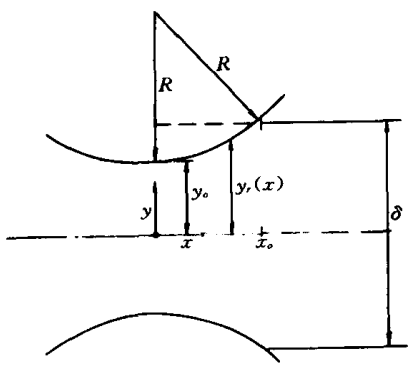


图 9-6　压延过程分析示意图

功率消耗与过程的经济性密切相关，如果在功率消耗和操作及设计变量之间有一个理论关系式，则过程的经济性便可以优化。

因此，这就需要一个数

学模型，在其中输入各量，如速率、轧辊尺寸、两辊间的间隙以及流体性质以函数形式与输出各量，即轧辊分开力和功率消耗相连。此适当的模型方程必须以质量和动量守恒原理加以推导。

b）初步分析

一个压延过程的数学描述建立在好几个简化假设的基础之上。

一个高粘物料相对低速通过系统可以假设为层流流动并且可用润滑近似。

聚合物具有复杂的结构，通常表现为某种程度的粘弹性。为了越过数学上的复杂性，在本例中其特性仅设为牛顿流体特性。

轧辊半径远远大于两辊间的间隙，在分析的初始阶段，轧辊的曲率尚不能忽略，仅在最后的表达式中可以据以简化。

模型化的目标是将各积分量公式化，因此，必须考虑在微观上的模化，因为压力和速度两者都是系统中空间变量的连续函数。

模型方程是在等温和稳态条件下开发的。

c）模型开发

模型开发就是将分析中的目标数学公式化。

由于假设牛顿流体特性，则轧辊分开的力和功率消耗可以下式表达：

$$F=W\int_{-\infty}^{x_0}p(x)\mathrm{d}x \tag{9-47}$$

和

$$\dot{E}=2VW\mu\int_{-\infty}^{x_0}\frac{\mathrm{d}V_x}{\mathrm{d}y}\Big|_{y=y_r(x)}\mathrm{d}x \tag{9-48}$$

注意，式(9-48)暗示系统是作对称考虑的。上式中各种符号的意义直接由图 9 6 说明。以上两式中的积分仅当压力和速度函数为已知时才能进行运算。

基于初步分析中的假设，Navier-stokes 方程简化为：

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}=\mu\frac{\mathrm{d}^2V_x}{\mathrm{d}y^2} \tag{9-49}$$

边界条件说明轧辊表面无滑移速度，并且也示出速度剖面对中心平面对称：

$$V_x=V \quad \text{在 } y=y_r(x)\text{处}$$

$$\frac{\mathrm{d}V_x}{\mathrm{d}y}=0 \quad \text{在 } y=0 \text{ 处} \tag{9-50}$$

压力的边界条件在材料与轧辊分开的点处是特别的，那里材料压力与周围大气相同：

$$p=p_a \quad \text{在 } x=x_0 \text{ 处} \tag{9-51}$$

压延问题的数学描述仍然是不完备的，因为只有一个方程，即式(9-49)，和两个自变量 $p(x)$和 $V_x(y)$。运用物质连续性原理，可以得到一个有关基本量之一的补充独立关系。考虑位于两辊之间一部分聚合物材料，并以垂直于运动方向的两平面，其位置为从原点的任意距离($0<x<x_0$)和到板材分开处($x=x_0$)所界定(参阅图 9-6)：

$$2\rho W\int_0^{y_r(x)}V_x(y)\mathrm{d}y=2\rho VWy_r(x_0) \tag{9-52}$$

注意，固化后的板材以不变的速度 V 在运动，而量 $y_r(x_0)$是板材的厚度。

确定轧辊表面到中心平面 $y_r(x)$间的解析表达式现在是合适的。参考图 9-6，从几何上考虑，下列表示可以严格地推导：

$$y_r(x)=y_0+R-R\left[1-\left(\frac{x}{R}\right)^2\right]^{1/2} \tag{9-53}$$

方括号内的表达式可以展成二项式级数，因为 $1\gg(x/R)^2$，所以，仅需取此级数的前两项即可：

$$\left[1-\left(\frac{x}{R}\right)^2\right]^{1/2}\approx 1-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{R}\right)^2 \tag{9-54}$$

式(9-53)重写如下：

$$y_r(x)=y_0+\frac{x^2}{2R} \tag{9-55}$$

至此这一组描述方程及其边界条件已经完备。现在将其转化为无因次形式。使用早先介绍的方法，无因次变量的定义如下：

$$\bar{v}=\frac{v}{V},\quad \bar{y}=\frac{y}{y_0},\quad \bar{x}=\frac{x}{[2Ry_0]^{1/2}},\quad \bar{p}=\frac{py_0}{\mu V}$$

式(9-49)～式(9-52)可以重写为：

$$\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\bar{x}}=\left[\frac{2R}{y_0}\right]^{1/2}\frac{\mathrm{d}^2\bar{v}}{\mathrm{d}\bar{y}^2} \tag{9-56}$$

$$\bar{v}=1 \quad 在\bar{y}=\frac{y_r}{y_0}处$$

$$\frac{\mathrm{d}\bar{v}}{\mathrm{d}\bar{y}}=0 \quad 在\bar{y}=0$$

$$\bar{p}=0 \quad 在\bar{x_0}=\frac{x_0}{[2Ry_0]^{1/2}} \tag{9-57}$$

$$\int_0^{y_r/y_0}\bar{v}\mathrm{d}\bar{y}=1+\bar{x_0}^2 \tag{9-58}$$

细查式(9-56)可以看出，压力梯度依赖于 x，而等式右边仅是 y 的函数，此式要能相等仅当等号两边均等于某个常数才能实现。积分式(9-56)并利用边界条件式(9-57)则得无因次速度剖面如下：

$$\bar{v}=1+\left[\frac{y_0}{8R}\right]^{1/2}[\bar{y}^2-(1+\bar{x}^2)^2]\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\bar{x}} \tag{9-59}$$

将此式代入式(9-58)积分后可得：

$$\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\bar{x}}=\frac{\bar{x}^2-\bar{x}_0^2}{(1+\bar{x}^2)^3}\left[\frac{18R}{y_0}\right]^{1/2} \tag{9-60}$$

以上两式结合起来可以求出以空间变量显函数表达的速度分布：

$$\bar{v}=\frac{2+3\bar{x}_0^2[1-\bar{y}_r^2]-\bar{x}^2[1-3\bar{y}_r^2]}{2[1+\bar{x}^2]} \tag{9-61}$$

式中，$\bar{y}_r=y/y_0$。类似地，积分式(9-60)并结合边界条件式(9-57)中第三式，则可得出压力分布如下：

$$\bar{p}=\left[\frac{9R}{32y_0}\right]^{1/2}f(\bar{x},\bar{x}_0) \tag{9-61a}$$

式中，$f(\bar{x},\bar{x}_0)$是一个复杂的函数。

至此，可以写出我们感兴趣的模型方程：将上式代入式(9-47)，积分之，则得出使轧辊分开的力：

$$F=\frac{\mu VRW}{y_0}g_1(\bar{x}_0) \tag{9-62}$$

在确定轧辊表面上的速度梯度之后，由式(9-48)可以得出功率消耗

$$\dot{E}=3WV^2\mu\left[\frac{2R}{y_0}\right]^{1/2}g_2(\bar{x}_0) \tag{9-63}$$

最后指出，式(9-62)和(9-63)已经达到了预定目标，将 F 和 $\dot{E}$ 与系统参数(R,W,y_0)，操作变量(V)和流体性质(μ)联系起来，并进一步可求出板材厚度 $y_r(x_0)$。今后模型方程的改进途径之一为考虑流体的真实流变特性。

9.5 挤　　出

a) 过程描述

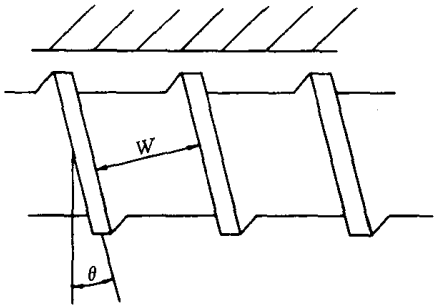


图 9-7　挤出机示意

挤出是聚合物加工中的一个重要工序。在大多数加工过程中，聚合物材料需要均匀化并且随后泵送到过程操作的下一道工序(参见图 9-7)。泵送使物料跟着螺杆在运动并朝向一个开孔经此卸下。为了能经济地操作，挤出机的设计需要一个可行的数学模型以提供机械性能和操作变量之间的关系。特别是，输出量，如功率消耗和流体流动速率必须与输入量如流体性质(μ,ρ)，操作参数(转速)以及设备参数(孔尺寸,螺旋尺寸等)在数学上联系起来。模型方程可以从动量守恒原理上加以推导。

b) 初步分析

基本守恒方程可因做几个假设而得以简化。流体特性假设为牛顿本构关系。对复杂结构的聚合物材料流动特性，如此理想化当然不真实，但是有利于避免数学上的麻烦，因此，本例可以得到更清晰的表达。

描述方程还可以进一步简化，如果假设稳态、等温和层流。同时，高粘聚合物流经挤出机常常允许使用润滑近似。

在挤出设备中,流体充满一个筒体与螺旋之间的空间。材料的厚度 B 通常比螺旋直径 D 小得多：

$$\frac{B}{D}\ll 1$$

因此，系统的曲率可以忽略不计。

如果展开一节螺旋流道，系统的几何形状可以大大地简

化，并可以一个平行板系统相近似(参见图 9-8)。上面平板代表筒体，假设以速度 V 运动，与螺旋轴有一个 θ 倾角。

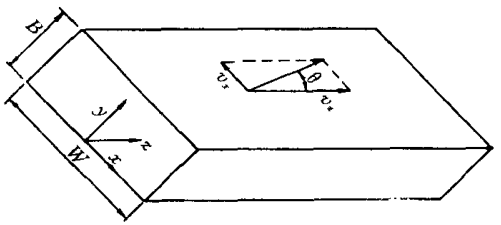


图 9-8　螺旋流道展开几何示意图

c) 模型开发

首先，两个输出量公式化成一般的数学项。将相对筒体速度$\overline{V}$分解为其诸分量后，显而易见，仅 E 分量与流体运动有贡献，故流量为：

$$Q=W\int_0^B v_z(y)\mathrm{d}y \tag{9-64}$$

非常有趣地注意到另外的非零速度分量 v_x，仅驱使材料作横过流道截面的循环，因此，导致在材料输送方向上无运动，即

$$\int_0^B v_x(y)\mathrm{d}y=0 \tag{9-65}$$

根据功率消耗的定义，它是速度与力的乘积。对所论问题，它可以表示成相对筒体速度和在流体与筒体界面上的摩擦力的函数：

$$\dot{E}=\int_A \boldsymbol{V}(A)\cdot\tau(A)\cdot\mathrm{d}A \tag{9-66}$$

式中，$\boldsymbol{V}$ 和 τ 是作用在流体与筒体界面的量。

利用图 9-8 所示的坐标系，式(9-66)也可以向量和张量分量表示之：

$$\dot{E}=W\int_0^L[-v_x\tau_{yx}+v_z\tau_{yz}]_{y=B}\mathrm{d}z$$

此式与牛顿本构方程结合，可得：

$$\dot{E}=\mu W\int_0^L\left[v_x\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}y}-v_z\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}y}\right]_{y=B}\mathrm{d}z \tag{9-67}$$

式(9-64)和(9-67)不但表示一般模拟目标的数学模型化，而且建立了所需要的聚合物的速度剖面 $v_x(y)$和 $v_y(x)$。下一步考虑 Navier-stokes 方程的简化，根据初步分析中所作的假设有：

$$\frac{\partial p}{\partial x}=\mu\frac{\mathrm{d}^2v_x}{\mathrm{d}y^2} \tag{9-68}$$

$$\frac{\partial p}{\partial z}=\mu\frac{\mathrm{d}^2v_z}{\mathrm{d}y^2} \tag{9-69}$$

边界条件为：

$$\begin{aligned}
&v_x=0 && \text{在 } y=0 \text{ 处}\\
&v_x=-V_x && \text{在 } y=B \text{ 处}\\
&v_z=0 && \text{在 } y=0 \text{ 处}\\
&v_z=V_z && \text{在 } y=B \text{ 处}
\end{aligned} \tag{9-70}$$

因为压力梯度 $\partial p/\partial z$ 为一常数而且等于可测压力损失 $\Delta p/L$，式(9-69)结合后两个边界条件可以积分，于是可得速度分量 v_z 的表达式如下：

$$v_z=\frac{V_zy}{B}+\frac{y}{2\mu}[y-B]\frac{\Delta p}{L} \tag{9-71}$$

同理，利用上述前两个边界条件，式(9-68)可以积分得出：

$$v_x=-\frac{yV_x}{B}-\frac{\partial p}{\partial x}\frac{y}{2\mu}[B-y] \tag{9-72}$$

至此，剩下需要确定的仅仅是压力梯度 $\partial p/\partial x$ 如何与输入量联系起来？上式再结合式(9-65)积分之，可得：

$$\frac{\partial p}{\partial x}=-6\mu\frac{V_x}{B^2} \tag{9-73}$$

将此式代回式(9-72)可以消去压力梯度，即

$$v_x=\frac{yV_x}{B}\left[2-\frac{3y}{B}\right] \tag{9-74}$$

于是可得体积流量：

$$Q=\frac{WBv_z}{2}-\frac{B^3W}{12\mu}\frac{\Delta p}{L} \tag{9-75}$$

微分式(9-74)和(9-71)得速度梯度：

$$\left.\frac{\partial v_x}{\partial y}\right|_{y=B}=-\frac{4V_x}{B} \tag{9-76}$$

和

$$\left.\frac{\partial v_z}{\partial y}\right|_{y=B}=\frac{V_z}{B}+\frac{B}{2\mu}\frac{\Delta p}{L} \tag{9-77}$$

最后，将上两式代入式(9-67)并积分则得功率消耗：

$$\dot{E}=WL\left\{\frac{\mu}{B}(V_z^2+4V_x^2)+\frac{\Delta p}{L}\frac{BV_z}{2}\right\} \tag{9-78}$$

最后指出，式(9-75)表示挤出速度与压力是线性关系，且已被实验所证实。但是，功率消耗却与实验数据不太符合，约偏小 1.5 倍左右。

9.6 导 线 涂 布

a) 过程描述

导线用聚合物材料涂布是一个重要的工业过程。涂布设备(参见图 9-9)由一个口膜连接一个盛满聚合物熔体的圆柱形器具组成。导线放置在工艺设备内并且以一定的速度通过口模。

本论题的主要目的是寻找合适的操作条件以便能生产出

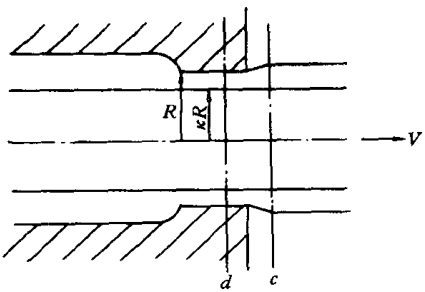


图 9-9　道线涂布过程示意

规定涂膜厚度的产品。通常，涂层厚度依赖于一系列操作变量、系统参数，以及流体性质。将上述所有变量之间关系定量化对设计符合规定产品参数的新装置绝对有用。

输入的信息包括流体的物理性质(密度和粘度)、导线和口模半径、压力梯度以及导线的运动速度、输出量为涂层厚度。因变量与自变量之间的理论关系可以由质量和动量守恒原理加以推导。

b) 初步分析

在导线涂布过程中，流体经口模流动是轴向环流。假设为层流状态，仅有的重要速度分量是 $v_z(r)$(根据系统的几何形状，此处选择柱坐标系)。

操作条件允许进一步假设为稳态和等温系统。影响膜厚度的表面张力在模拟的最初阶段予以忽略。作为聚合物流体特性的一级近似，可以使用牛顿本构方程。

最后，必须指出，模型方程可以考虑成两个流动类型：模型 X 中，流体流动只是由于导线运动阻力所引起，而模型 Y 则考虑为与压力梯度共同作用的结果。

c) 模型开发

模型 *X*

考虑质量连续性原理，在稳态时两个控制面的质量流率应相等：

$$w_d = w_c \tag{9-79}$$

基于几何条件和观察，一旦涂布物料固化，即离开口模，可以写出如下方程：

$$w_c=\rho_c\pi[(\kappa R+\delta)^2-(\kappa R)^2]\ V \tag{9-80}$$

注意，固化后的物料假设与导线同一速度运动，即 V，而 δ 表示膜厚度。

口膜内物料的类流体特性使其必须考虑流体的速度分布，聚合物的质量流率于是可以表达为：

$$w_d=\rho_d 2\pi\int_{\kappa R}^{R} r v_z(r)\mathrm{d}r \tag{9-81}$$

上式只有已知速度剖面后才能积分。对于在初步分析中遇到的条件，Navier-stokes 方程简化形式和边界条件为：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}r}\right)=0 \tag{9-82}$$

$$v_z=V \quad \text{在 } r=\kappa R \text{ 处} \tag{9-82a}$$

$$v_z=0 \quad \text{在 } r=R \text{ 处} \tag{9-82b}$$

速度函数 $v_z(r)$ 可以由式(9-82)～(9-82b)得到，并且可以写成无因次形式如下：

$$\frac{v_z}{V}=\frac{\ln\dfrac{r}{R}}{\ln\kappa} \tag{9-83}$$

将 v_z 代入式(9-81)并且随后用分部积分法则可得：

$$w_d^d=\frac{\pi\rho_d V R^2}{2\ln\kappa}[\kappa^2-1-2\kappa^2\ln\kappa] \tag{9-84}$$

在最后一步，将式(9-80)和(9-84)代回式(9-79)并重排成$\bar{\delta}$的二次方程的形式：

$$\bar{\delta}^2+2\bar{\delta}-\frac{\rho_d}{\rho_c}g(\kappa)=0 \tag{9-85}$$

式中，$\bar{\delta}$表示无因次涂布厚度 $\delta/\kappa R$，而

$$g(\kappa)=\frac{\kappa^2-1-2\kappa^2\ln\kappa}{2\kappa^2\ln\kappa}$$

式(9-85)的正根提供了涂层厚度的计算公式：

$$\bar{\delta}=-1+\left[1+\frac{\rho_d}{\rho_c}g(\kappa)\right]^{1/2} \tag{9-86}$$

作为结论，必须注意：首先，根据式(9-86)，膜厚与导线运动速度无关；其次，在阻力流动(模型 X)条件下，膜厚的任何改变都将要求口模直径作相应改变(不同的 κ)。

模型 *Y*

现在来研究一下压力梯度对口模上游流体的影响。Navierstokes 方程修正如下：

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}=\frac{\mu}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}r}\right] \tag{9-87}$$

其 4 个边界条件：

$$p=p_0 \quad \text{在 } z=0 \text{ 处} \tag{9-89a}$$

$$p=p_L \quad \text{在 } z=L \text{ 处} \tag{9-89b}$$

$$v_z=0 \quad \text{在 } r=\kappa R \text{ 处} \tag{9-89c}$$

$$v_z=0 \quad \text{在 } r=R \text{ 处} \tag{9-89d}$$

而且其速度分布可以马上得到：

$$v_z=\frac{\Delta pR^2}{4\mu L}\left[1-\left(\frac{r}{R}\right)^2+(1-\kappa^2)\frac{\ln\frac{r}{R}}{\ln\frac{1}{\kappa}}\right] \tag{9-90}$$

将式(9-90)代入式(9-81)然后积分之，得

$$w_d^b=\frac{\pi\Delta pR^4\rho_d}{8L\mu}\left[1-\kappa^4-\frac{(1-\kappa^2)^2}{\ln\frac{1}{\kappa}}\right] \tag{9-91}$$

上式仅仅表示由于压力梯度引起的质量流率。但是，在所论情况下，阻力和压力两者都包括在内。于是，其总流率

应为式(9-91)再加上式(9-84)，即

$$w_d^{\beta}=w_d^{d}+w_d^{p} \tag{9-92}$$

注意如此的简单相加，只有在牛顿流体的情况下才有可能。

类似于模型 X，应用连续性原理，则涂布厚度的二次方程可以得到如下：

$$\bar{\delta}^2+2\bar{\delta}-\frac{\rho_d}{\rho_c}[f(\kappa)-sp(\kappa)]=0 \tag{9-93}$$

式中，

$$f(\kappa)=\frac{1-\kappa^2}{2\kappa^2\ln\frac{1}{\kappa}}-1$$

$$p(\kappa)=\frac{1}{8\kappa^2}\left[1-\kappa^4-\frac{(1-\kappa^2)^2}{\ln\frac{1}{\kappa}}\right]$$

以及

$$s=\frac{\Delta pR^2}{VL\mu}$$

式(9-93)的正根再一次成为所论问题的解：

$$\bar{\delta}=-1+\left\{1+\frac{\rho_d}{\rho_c}[f(\kappa)+sp(\kappa)]\right\}^{1/2} \tag{9-94}$$

最后必须指出，考查式(9-86)得知，涂布厚度仅仅依赖于流体在两个不同位置的密度比以及参数比。因此，在任何一个现有的设备上想改变操作条件来控制涂布厚度是不可能的。可以用在流体贮槽上施加压力的方法以控制涂布厚度。根据式(9-94)，即在模型 Y 的条件下，改变导线运动速度可以达到同样的目的。

两个模型的限制可以从使用的假设上看出来。而忽略表面张力的影响使结论进一步受到限制，这也是读者可以进一步改进的起点。

符 号 说 明

B 材料厚度[m]
D 螺旋直径[m]
$\dot{E}$ 功率消耗[J/s]
F 力，卷绕力[N]
L 距离[m]
N 无因次数群[-]
p_{ii} 法向应力[Pa]
p 张力，压力[Pa]
Q 流量[m^3/s]
R 半径[m]
$r(z)$ 气泡或丝条半径[m]
V，v 速度[m/s]
W 宽度[m]
w 质量流率[kg/s]
Z 坐标轴距离[m]

希腊字母

α 角度[°]
δ 膜厚度[m]
ζ 坐标轴[m]
θ 倾角[°]
κ 半径比[-]
μ 牛顿粘度[Pa·s]
ρ 密度[kg/m^3]
τ 剪应力[Pa]
ϕ 角度[°]

下标

0 初始的
1 坐标轴方向
2 坐标轴方向
3 坐标轴方向
d 处的
L 处的
p 压力的

参 考 文 献

[1] Petrie C J S. Polym Eng Sci, 1975, 15: 708

[2] Middleman S. Fundamentals of Polymer Processing. New York: Mc-Graw-Hill Book Company, 1977

[3] Mckelvey J M. Polymer Processing. New York: John wily & Sons Inc, 1962

[4] Stanislav J F. Mathematical Modeling of Transport Phenomena Processes. Ann Arbor Science, 1982

[5] 江体乾著. 工业流变学(第11章). 北京: 化学工业出版社, 1995

第10章 随机模型

10.1 前 言

在本书的第1章1.4中已经说过，化学工程中有两类数学模型，即确定性模型与随机模型。直到第9章为止，所介绍的数学模型都是属于确定性的模型，但是还有另一类允许在数学描述中有随机性因素存在的随机模型。在此模型中的量是当作随机的量，即人们完全不知道它的精确值，而仅仅知道该变量取某个值的概率。

现在出现了一个问题，即什么时候应该采用随机模型，这是无法明确回答的。因为它不但决定于所研究的系统，还决定于最终的目的。但是，随机模型总用于随机系统，反之，不真。

在一个化工系统中，可以碰到下列三种随机性：

(1) 系统本身是确定的，但输入量对于系统是随机的；

(2) 系统的基本性质是随机的；

(3) 输入和系统两者都是随机的。

作为第一种情况的例子为层流反应器。第二种情况可用充分混合反应釜作代表，也可用填充床反应器作代表，因为每种反应器都可产生随机输出。具有波动输入的上述各种反应器是第三种情况的代表。

但是，不管什么形式的反应器，流动是非常重要的因素。因为传热和传质总是流动伴生的现象。而且流动现象是放大过程中最不易确定的因素。在化学反应工程中总是将流动的

两个极限状况(*i*)理想排挤，或称活塞流和(*ii*)理想混合，规定为比较标准。前者的特点是：在垂直于流动方向的截面上，所有的物系都是均匀的。即各点的温度相等，浓度相等，乃至压力、速度都相等，所有流体的粒子在反应器中的停留时间均相同。而后者的特征为：在整个反应器中，各点的温度、浓度都相等，且等于反应器出口处的值，但其中各分子的停留时间参差不齐，有一个典型的分布。

工业生产上用的反应器大多数介于上述两种理想流型之间，即不完全混合。而且在连续反应系统中，流经反应器的质量具有不同的停留时间，因而这些粒子间的混合称为“逆向混合”，亦称“返混”。这里的“返混”是指时间概念上的逆向。由于物料与流向相反运动，或者流速分布不均匀，以及反应器内有死角等，都可引起逆向混合。

一般来说，逆向混合是个有害的因素，它可使反应速率降低。逆向混合可由停留时间分布的宽窄程度来表示。因此，为研究实际设备中的返混现象，常常需进行停留时间分布的测定，其实验手段就是示踪剂的试验。

停留时间分布理论的基本概念并不难，大部分都可以根据初等概率论[3]推出。然而，停留时间分布的研究却成为近年来化学工程中的一种重要的手段。下面将介绍它的基本定义和方法，以及串联理想混合釜的数学模型。

10.2 基 本 定 义

现以流体流过容器为例，设在时刻 $t=0$，瞬时注入示踪剂的量为 q(一示踪脉冲)，并对输出量进行长时间的观测，令 $C(t)$表示在时刻 t 流出物中示踪剂的浓度，并令 Q 表示流体的流率(体积流量)，则在 t 与 $t+\Delta t$ 之间流出的摩尔数为 QC

$(t)\mathrm{d}t$，当 $t\to\infty$ 时，所有的示踪剂都将流出系统。故

$$q=Q\int_0^\infty C(t)\mathrm{d}t \tag{10-1}$$

于是，示踪剂在出口流体中的分率，也就是在停留时间介于 t 与 $t+\Delta t$ 之间的示踪剂的分率：

$$\frac{QC(t)\mathrm{d}t}{Q\int_0^\infty C(t)\mathrm{d}t}=\frac{C(t)\mathrm{d}t}{\int_0^\infty C(t)\mathrm{d}t} \tag{10-2}$$

此分率即称为停留时间密度函数 $E(t)$。显然

$$\int_0^\infty E(t)\mathrm{d}t=1 \tag{10-3}$$

即具有归一化性质。

停留时间分布函数 $F(t)$，又称为累计停留时间分布函数，其定义为：流过系统的物料中停留时间小于 t 的(即介于 $0\sim t$ 之间)物料(示踪剂)分率。根据这一定义，可以看出：

$F(0)=0$，而 $F(\infty)=1$，故知

$$F(t)=\int_0^t E(t)\mathrm{d}t \tag{10-4}$$

$$E(t)=\mathrm{d}F(t)/\mathrm{d}t \tag{10-5}$$

同样，如果关心一下年龄由 t 到 $t+\mathrm{d}t$ 内示踪剂在系统内的分率，则可将此写为(或定义为)$I'(t')\mathrm{d}t'$，其中的 $I'(t')$ 为系统内部年龄密度函数。

现在来确定 $E(t)$ 与 $I(t)$ 之间的关系。

设有一体积为 V 的容器，体积流量为 Q，令在 $t=0$ 之后进入的流体称之为新流体，而在 $t=0$ 时容器中已有的流体称之为老流体，则在某一稍后的时刻 t，系统中的新流体为

$$V\int_0^t I(t)\mathrm{d}t$$

流出的流体为：

$$\int_0^t Q\mathrm{d}t' \int_{t'}^{\infty} E(t)\mathrm{d}t$$

显然，这两个流体的量必然相等，即

$$V\int_0^t I(t)\mathrm{d}t = \int_0^t Q\mathrm{d}t' \int_{t'}^{\infty} E(t)\mathrm{d}t \tag{10-6}$$

然后对上式两边求导，则得

$$\frac{V}{Q}I(t) = \int_t^{\infty} E(t)\mathrm{d}t = 1 - \int_0^t E(t)\mathrm{d}t \tag{10-7}$$

再一次对 t 求导，则得：

$$E(t) = -\mu \frac{\mathrm{d}I(t)}{\mathrm{d}t} \tag{10-8}$$

式中，$\mu = V/Q$，即设容器的进出口无扩散而流型为柱塞流时的情况。

令 $\theta = t/\mu$ 为一无因次时间，则上式变为

$$E(\theta) = \frac{\mathrm{d}I(\theta)}{\mathrm{d}\theta} \tag{10-9}$$

接下来确定 $I(t)$ 与 $F(t)$ 之间的关系。

假定在 $t=0$ 时，入口流体完全是浓度为 C_0 的示踪剂。显然设在 $t=0$ 之前，系统中流体的浓度也是 C_0。令 $t=0$ 之后进入的流体为新流体。则在时间 t 时系统中的新流体量为：

$$VC_0\int_0^t I(t)\mathrm{d}t$$

在大于 t 时流出的流体分率为

$$\int_t^{\infty} E(t)\mathrm{d}t = 1 - \int_0^t E(t)\mathrm{d}t$$

从时间 0 至 t 排出的老流体为：

$$QC_0\int_0^t \mathrm{d}t' \int_t^{\infty} E(t)\mathrm{d}t$$

因 V 为常数，故进入的新流体的量必等于排出老流体

的量。

$$V\int_0^t I(t)\mathrm{d}t=Q\int_0^t \mathrm{d}t\int_t^\infty E(t)\mathrm{d}t \tag{10-10}$$

上式对 t 求导，则得：

$$VI(t)=Q\int_t^\infty E(t)\mathrm{d}t \tag{10-11}$$

结合式(10-4)则上式变为

$$\mu I(t)=1-F(t) \tag{10-12}$$

或者写为无因次形式，即

$$I(\theta)=1-F(\theta) \tag{10-13}$$

在停留时间分布的实验测定中，常用的有两种方法：

(1) 阶跃式示踪法：在设备达到稳定流动后，自某一瞬间开始连续加入流量与前相同，流体性能(指影响流型的性能)亦同，但又载有示踪剂的流体，分析出口处示踪剂随时间的变化曲线，即是 F 曲线。F 曲线通常以 $C(t)/C_0$ 对 t/μ 作图，C_0 是示踪剂在进入流体中的浓度。典型的 F 曲线如图 10-1 所示。

(2) 脉冲式示踪法，在设备达到稳定流动后，于某一瞬间加入一定量的示踪剂，同时分析出口处示踪剂浓度随时间的变化曲线，即 E 曲线，有时又称为 C 曲线。典型的 C 曲线如图 10-2 所示。

作为本节的小结，扼要说明 E、C、I 和 F 之间的关系。

(1) C 曲线与停留时间分布密度函数 E 完全一致。

(2) 由 1 减去 F 曲线上每一点的值就得到内部年龄分布函数 I。

(3) 对同一个容器，C 曲线就是 F 曲线的斜率。

$$C(\theta)=\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\theta} \tag{10-14}$$

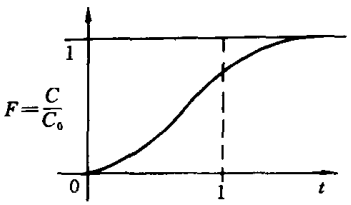


图 10-1　典型的 F 曲线示意图

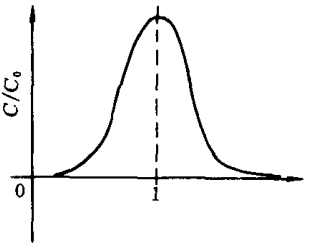


图 10-2　典型的 C 曲线示意图

（4）F 曲线代表这一瞬间以前 C 曲线下面的面积：

$$F(\theta)=\int_0^{\theta} C(\theta')\mathrm{d}(\theta') \qquad (10\text{-}15)$$

这些关系为确定反应器的年龄分布和停留时间分布提供了基础。

10.3　停留时间分布的研究

通过停留时间分布的研究可以获得平均停留时间和混合程度的信息，这对预测系统中所发生的化学转化率甚为重要。

对类型相同但尺寸不同的容器，通过停留时间分布的比较可以考察流动性对模拟放大的影响。而且在某些非均相系统中，可以直接用于设计。例如，在连续置换催化剂的气固催化反应器中，催化剂颗粒的停留时间分布是基本的设计变量。

在一个系统中进行示踪试验，对分析设备存在的死角和沟流很有用途。

容器中的死区指的是流体停留时间比通过系统的总平均停留时间长得多的那个区域。死区的存在与否可通过 $E(t)$ 曲线知道。如果 $E(t)$ 曲线有一个很长的“尾巴”，就表明进入死区的流体将很慢的离开。在串联釜式反应器或塔器中可以

看到。

所谓沟流就是指流体通过容器所用的时间比流体的总平均停留时间短得多。沟流在填料塔或固定床反应器中常有发现。而既有死区又有沟流的典型例子就是流化床。图 10-3 概括地表示出死区和沟流时 $F(\theta)$的特征。

停留时间分布特别重要的用途是确定系统的数学模型。常用的方法就是对系统做一个或几个示踪剂试验。有了示踪剂的输出曲线就可以定出同输出曲线相近的数学模型。模型参数通常与流体性质、设备尺寸、流速、混合粘度等有关。如此确定的参数，就能使模型与实际的输入相匹配。

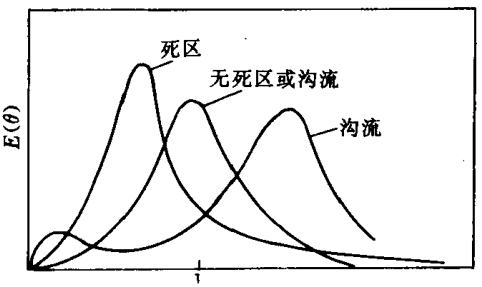


图 10-3　死区与沟流

当人们做了一个示踪剂试验并且得出了 $E(\theta)$和 $F(\theta)$后，应该选什么样的模型来描述这个系统呢？为此，首先要确定是确定性模型还是随机模型？最常用的办法是选择一个确定性模型，其中包含一个或几个可使模型的计算结果与实验数据(曲线)相拟合的“可调”参数。

10.4　N 个串联的理想混合器模型

a) 过程描述

由反应工程可知，多数反应器的性态均介于柱塞流和理想混合两种极限情况之间。而这两种极限情况的停留时间特性已如图 10-4 所示。通常有两种作法：第一，选用柱塞流和

理想混合流的串并联组合形式来代表真实系统，称为组合模型。第二，即采用一种混合过程的扩散表现，称为扩散模型。本节所述为前者。

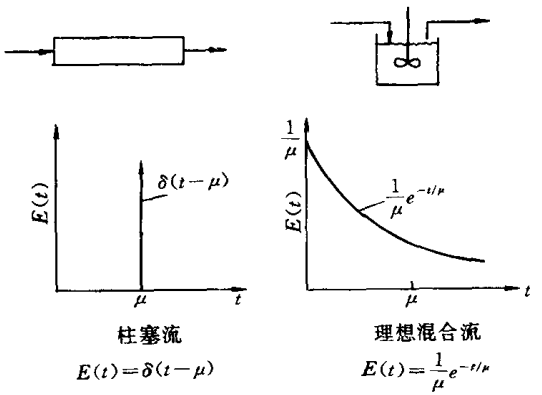


图 10-4　柱塞流和理想混合流系统的停留时间特性

设有 N 个相同的且每个容积均为 v 的理想混合容器串联在一起，考察其停留时间分布函数 $E(t)$ 与各参数之间的关系即数学模型。

b）初步分析

由于本题是以理想混合流串联组合来代替真实系统的，所以示踪剂通过整个系统，即所有容器必须是均匀分布。

c）模型开发

如题所示，已知有 N 个相同的，并且每个容积均等于 v 的理想混合反应器串联起来，通过系统的体积流率为 Q，而系统的总容积设为 V，于是有：

$$V=Nv \tag{10-16}$$

对于第 n 个反应器的物料衡算为：

$$v\frac{dC_n}{dt}=Q(C_n-C_{n-1}) \qquad n=1,\ 2,\ \cdots,\ N \tag{10-17}$$

式中 C_n 为第 n 个反应器中示踪剂的浓度，t 为时间。

开始时，即 $t=0$ 时，所有反应器中示踪剂的浓度为零，并且有一个示踪剂脉冲注入反应器 1，即：

$$C_n=0,\ n=1,\ 2,\ \cdots,\ N,\ t=0\text{ 时} \tag{10-18}$$

$$C_0=\overline{C}\frac{V}{Q}\delta(t) \tag{10-19}$$

式中$\overline{C}$为示踪剂的平均浓度，$\delta(t)$为单位脉冲函数或 Direc δ 函数。

以上就是初始条件。以条件(10-18,10-19)对式(10-17)求解即可定出停留时间分布函数 $E(t)$。

由 Laplace 变换理论可知：n 个连续搅拌槽或反应器串联，且体积均相等时，其传递函数为[1]：

$$\overline{g}(s)=\frac{1}{(1+\overline{\theta}s)^n} \tag{10-20}$$

式中$\overline{\theta}$为物理过程的时间单位，对照本题实际情况，上式应写为：

$$\overline{C}_n(s)=\frac{\overline{C}^0V/Q}{(1+sv/Q)^n} \tag{10-21}$$

此式的解，即反 Laplace 变换，为

$$C_N(t)=\frac{\overline{C}V}{Q}\frac{1}{(N-1)!}\left(\frac{NQ}{V}\right)^N t^{N-1}\exp\left(\frac{-NQt}{V}\right) \tag{10-22}$$

如令 $\theta=tQ/V$，则：

$$C(\theta)=\frac{C}{\overline{C}}=\frac{N^N}{(N-1)!}\theta^{N-1}e^{-N\theta} \tag{10-23}$$

此式表达的 $C(\theta)$曲线就是停留时间分布密度函数 $E(\theta)$。

各 N 值的 $E(\theta)$曲线如图 10-5 所示。由图可以看出，随着 N 值的增加，每个反应器的容积 v 就要减小，才能保持总

容积不变。于是，当 N 值增加时，由于相邻反应器的浓度差就减小，故混合程度将降低。

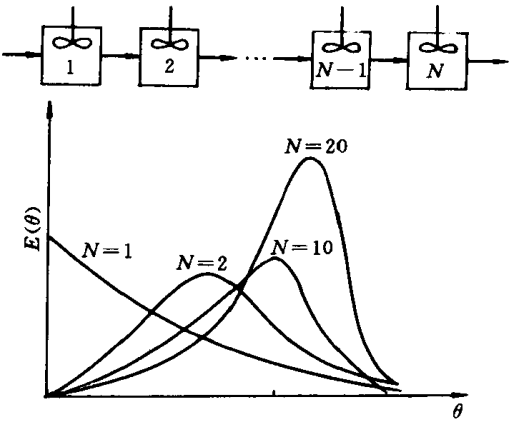


图 10-5　N 个串联的理想混合反应器的停留时间特性

10.5　随机性流动系统模型

a）过程描述

上一节的确定性流动系统模型说明了过程的不可预测性。随机模型则企图直接说明系统的随机性质。在本节中将对理想混合反应器的多级串联系统进行讨论。

设有 N 个串联的理想混合反应器，先着重将示踪剂流体微元作为研究对象，而不考虑每个反应器中作为时间函数的示踪剂浓度。就物理现象而言，在 $t=0$ 时进入第一级反应器的流体微元随机地停留一段时间。然后此微元又移动到下一级，并又在其中停留一段时间。依此类推，直到此微元离开第 N 级为止。因为在任一时刻，微元必然在某一级之中（假定级间通过是瞬时的）。故微元的传递作为一个状态离散，时间连续的随机过程看待是合乎逻辑的。换句话说，过程的状态

就是在时刻 t 微元停留的容器，而时间则是连续变化的。显然，这里只有 N 个状态，即 N 个反应器。而可能的传递则是从状态 n 到 $n-1$。

b）初步分析

流体微元通过一系列理想混合反应器的运动是一个 Poission 过程。令 $x(t)$ 为时刻 t 流体微元进入的级数。则 $x(t)$ 可取值 1，2，…，N，而且 $x(t)$ 就是称之为状态离散时间连续的 Markov 过程。因此，$V_n(t)=Prob\{x(t)=n\}$。对于足够小的 dt，在反应器（状态）n 中微元离开该釜的概率是 $\lambda_n dt+0(dt)$。由于流体微元开始于釜 1，则初始条件为 $V_0=1$。

设 Q 为体积流率，V 为名级（釜）体积的总和，则第 n 级中的平均停留时间为 $\bar{\theta}=V_n/Q$，式中 V_n 为第 n 级的体积。我们的目的是求整个系统的停留时间分布。

c）模型开发

令 $V_n(t)$ 为流体微元于时刻 t 处于状态 n 中的概率。通过第 n 级的平均频率 $\lambda_n=1/\bar{\theta}_n$，因此，微元于时刻 $t+dt$ 处于状态（级）n 中的概率为下述两个概率之和，即微元于时刻 t 处于状态 $n-1$ 并在经过 dt 时间后传递到状态 n 的概率，以及微元于时刻 t 处于状态 n 并经过时间间隔 t 到 $t+dt$ 仍留在状态 n 中的概率。即

$$V_n(t+dt)=(\lambda_{n-1}dt)V_{n-1}(t)+(1-\lambda_n dt)V_n(t) \qquad (10\text{-}24)$$

或

$$V_1(t)=-\lambda_1 V_1,\quad V_n(t)=-\lambda_n V_n+\lambda_{n-1}V_{n-1},\quad n=2,3,\cdots N \qquad (10\text{-}25)$$

而初始条件为：

$$V_n(0)=\begin{cases}1, & n=1\\ 0, & n=2,3,\cdots N\end{cases} \qquad (10\text{-}26)$$

运用 Laplace 变换极易求出式(10-25)和(10-26)的解。因为

$$\frac{\overline{V}_n(s)}{\overline{V}_{n-1}(s)}=\frac{\lambda_{n-1}}{s+\lambda_n},\quad n=2,\ 3,\ \cdots,\ N \tag{10-27}$$

则有：

$$\overline{V}_n(s)=\frac{\lambda_{n-1}\lambda_{n-2}\lambda_{n-3}\cdots\lambda_1}{(s+\lambda_n)(s+\lambda_{n-1})\cdots(s+\lambda_1)},\quad n=1,\ 2,\ \cdots N \tag{10-28}$$

根据展开定理，反变换可得：

$$V_n(t)=\prod_{i=1}^{n-1}\lambda_i\left\{\sum_{j=1}^{n}\frac{\exp(-\lambda_j t)}{\prod\limits_{\substack{k=1\\k\neq j}}^{n}(\lambda_k-\lambda_i)}\right\} \tag{10-29}$$

在时间 t 和 $t+\mathrm{d}t$ 之间，微元离开第 N 个反应器(釜)的概率为 $V_n(t)\lambda_n\mathrm{d}t$，于是，停留时间分布密度函数 $E(t)$可由下式给出：

$$E(t)=V_N(t)\lambda_N=\prod_{i=1}^{N}\lambda_i\left\{\sum_{j=1}^{N}\frac{\exp(-\lambda_j t)}{\prod\limits_{\substack{k=1\\k\neq j}}^{N}(\lambda_k-\lambda_i)}\right\} \tag{10-30}$$

最后，建议对本章内容有兴趣的读者，可以进一步查阅参考文献[1]，那里有更复杂的模型。此处就不赘述了。

符 号 说 明

C 浓度[mol/m^3]
E 密度函数[-]
F 分布函数[-]
I 年龄分布函数[-]
N 个数[-]
Q 流量[m^3/s]
q 一脉冲注入量[mol]
t 时间[s]
V 容积[m^3]
v 单个容积[m^3]
x 级数[-]

希腊字母

δ 单位脉冲函数[-]
θ 无因次时间[-]

λ 参量[-]

μ 柱塞流特征时间[s]

下标

i 第i个的

k 第k个的

N 第N个的

参 考 文 献

[1] Seinfeld J H, Lapidas L. Mathematical Methods in Chemical Engineering. Vol 3. Prentice-Hall Inc, Engiewood Cliffs, N J USA, 1971

[2] 李启兴等编，化学反应工程基础－数学模拟法．北京：人民教育出版社，1981

[3] 江体乾著．化工数据处理(第二章)．北京：化学工业出版社，1984

[General Information]
书名=化工数学模型
作者=江体乾著
页数=201
SS号=10309709

出版日期＝１
９９９年０５
月第１版

前言
目录
第1章　数学模型导论
1.1　什么是数学模型
1.1.1　形象模型

１．１．２　数学模型

１．２．１　化工数学模型的分类

１．２．１　经验模型

１．２．２　随机模型

１．２．３　传递过程模型

１．３　化工数学模型的建模方法通论

１．３．１　通则

1.3.2 实例研究
1.4 为什么要建立数学模型
符号说明
参考文献
第2章 微观

动量、热量、质量守恒

2.1 前言

2.2 连续性方程

2.3 动量衡算与运动方程

２．３．１　用应力表示的运动方程

２．３．２　应力与形变速率之间的关系

２．３．３　Ｎａｖｉ

ｅｒ-Ｓｔｏｋｅｓ方程

２．３．４　非牛顿流体的推广

２．４　微分能量衡算方程

２．４．

１　对流体微元加入的热速率

２．４．２　表面应力对微元体所作功率

２．４．３　能量方程

的特定

２．５　质量传递微分方程

２．５．１　传质微分方程的推导

２．５．２　传质微分

方程的特定形式
符号说明
参考文献
第３章　润滑近似及其他
３．１　前言
３．

2　直观认识　3．
3　量级分析　3．
4　润滑方程　3．
5　涂布分析　3．
6　润滑近似法的用例　3．

7　结语和评论
符号说明
参考文献
第4章　积分平均
4.1　前言
4.

2　时间平均

4．2．1　时均化的连续性方程

4．2．2　运动方程的时均化

4．2．

3　能量方程的时均化

4.2.4　质量守恒方程时均化

4.2.5　均匀湍流

4.3　面积平均

4．4　局部体积平均
符号说明
参考文献
第5章　传递过程模型建立方法
5．

1　前言　5．
2　过程描述　5．
3　初步分析　5．3．
1　第一步--确定模拟水平

5.3.2 第二步--考虑简化假设

5.4.4 模型开发

5.4.1 写出描述方程

5．4．2　方程无因次化
符号说明
参考文献
第6章　经验模型——黑匣子模型
6．

1　前方
6．
2　因次论分析
6．
3　化工经验模型建模举例
符号说明
参考文献

第7章　传递过程模型

7.1　前言

7.2　流动模型

7.2.1　密封件在管道中的流动

7.2.2 大气污染

7.2.3 试井分析

7.3 热、质传递模型

7.3.1 太阳池

7.3.2 冷冻干燥

7.3.3 非牛顿流体薄膜流中热质传递模型

7.4 伴有化学反应的传递模

型

7.4.1 甲烷-空气燃料电池

7.4.2 伴有二级不可逆反应的幂律流体薄膜流中的化学吸

收　　符号说明　　参考文献
第８章　生物、医学工程中的模型　　８．１　前言　　８．

2　血液流动的数学模型　8．
3　血液氧合反应器模型　8．
4　血液低密度脂蛋白净化过程中过量净化剂分离－－间歇吸附模型

8.5 包裹酶反应器
符号说明
参考文献
第9章 聚合物加工中的模型
9.

1　前言　9．
2　薄膜吹塑　9．
3　纤维纺丝　9．
4　压延　9．
5　挤出　9．
6　导线涂布

符号说明
参考文献
第１０章　随机模型
１０．１　前言
１０．２　基本定义

10.3 停留时间分布的研究
10.4 N个串联的理想混合器模型
10.5 随机性流动系统模型
符号

说明

参考文献